

Räumlich hoch aufgelöste Modellierung des Spaltproduktverhaltens in einem HTR-Core mit kugelförmigen oder prismatischen Brennelementen

André Xhonneux

Forschungszentrum Jülich GmbH
Institut für Energie- und Klimaforschung
Nukleare Entsorgung und Reaktorsicherheit (IEK-6)

Räumlich hoch aufgelöste Modellierung des Spaltproduktverhaltens in einem HTR-Core mit kugelförmigen oder prismatischen Brennelementen

André Xhonneux

Schriften des Forschungszentrums Jülich
Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment

Band / Volume 243

ISSN 1866-1793

ISBN 978-3-95806-020-3

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek.
Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der
Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte Bibliografische Daten
sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Herausgeber
und Vertrieb: Forschungszentrum Jülich GmbH
Zentralbibliothek, Verlag
52425 Jülich
Tel.: +49 2461 61-5368
Fax: +49 2461 61-6103
E-Mail: zb-publikation@fz-juelich.de
www.fz-juelich.de/zb

Umschlaggestaltung: Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich GmbH

Druck: Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich GmbH

Copyright: Forschungszentrum Jülich 2014

Schriften des Forschungszentrums Jülich
Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment, Band / Volume 243

D 82 (Diss. RWTH Aachen University, 2014)

ISSN 1866-1793

ISBN 978-3-95806-020-3

Vollständig frei verfügbar über das Publikationsportal des Forschungszentrums Jülich (JuSER)
unter www.fz-juelich.de/zb/openaccess.

Alle Rechte vorbehalten. Kein Teil des Werkes darf in irgendeiner Form (Druck, Fotokopie oder
in einem anderen Verfahren) ohne schriftliche Genehmigung des Verlages reproduziert oder
unter Verwendung elektronischer Systeme verarbeitet, vervielfältigt oder verbreitet werden.

Räumlich hoch aufgelöste Modellierung des Spaltproduktverhaltens in einem HTR-Core mit kugelförmigen oder prismatischen Brennelementen

vorlegt von

Dipl.-Ing. André Xhonneux

Kurzfassung:

Einer der wichtigsten Aspekte bei der Genehmigung kerntechnischer Anlagen ist deren Freisetzungsverhalten von Radionukliden. Der Transportweg vom Entstehungsort bis in die Umgebung wird als Freisetzungskette bezeichnet. Im Rahmen dieser Arbeit wird die räumlich hochaufgelöste Spaltproduktfreisetzung aus kugelförmigen und prismatischen Brennelementen, der Transport mit dem Kühlgas sowie die Ablagerung auf Reaktoreinbauten im Detail simuliert.

Die am Forschungszentrum Jülich bisher entwickelten Programme zur Spaltproduktfreisetzungsberechnung werden analysiert, Defizite identifiziert und beseitigt. Auf dieser Basis wurde ein einheitliches Simulationsmodul mit dem Namen *Source Term Analysis Code System (STACY)* entwickelt, das alle Funktionalitäten der Einzelprogramme beinhaltet und gleichzeitig über deren Methodik hinausgeht. Dazu wurden die physikalischen Modelle erweitert, um z. B. das Temperaturprofil im Brennelement sowie den realen Inventaraufbau bei der Freisetzungsberechnung zu berücksichtigen.

Zentraler Bestandteil dieser Arbeit ist die automatisierte Behandlung des Freisetzungsverhaltens einer repräsentativen Anzahl von Brennelementen. Dies erlaubt eine räumlich hoch aufgelöste Freisetzungsberechnung, bei der für jeden Raumbereich eine individuelle Freisetzungsberechnung durchgeführt werden kann. Durch Kopplung mit dem Abbrandcode *Topological Nuclide Transmutation (TNT)* wird für jedes betrachtete Brennelement eine separate Abbrandberechnung durchgeführt. So wird nachgewiesen, dass das freigesetzte Inventar bei einer bestimmten Anzahl an Brennelementen hinreichend genau bestimmt werden kann. Mit Hilfe dieses Modells wird das Freisetzungsverhalten Beispiel einer Referenzanlage (HTR-Modul) untersucht. Sowohl die Freisetzung aus dem Gleichgewichtszustand als auch die während eines ausgewählten Störfalles (Kernaufheizphase nach einer schnellen Druckentlastung) werden betrachtet. Im Vergleich zu früheren Sicherheitsstudien fällt die kumulative Freisetzung der Kernaufheizphase langlebiger Nuklide durch das neue Rechenverfahren deutlich geringer, die Rate von I-131 jedoch um den Faktor zwei höher aus.

Die Freisetzungsberechnung ist auch für prismatische Brennelemente (z. B. des japanischen HTTR) möglich. Hierbei wird für jedes Brennelement der Abbrand und das Freisetzungsverhalten eines repräsentativen Compacts bestimmt.

Weiterhin wurde ein neues Kugelfließmodell *Software for Handling Universal Fuel Elements (SHUFLE)* entwickelt, mit dem das Kugelfließverhalten auch in einem multiphysikalischen Codepaket präziser als bisher abgebildet werden kann. Das Modell beschreibt die Bewegung kleinerer Kugelanreicherungen als eine Abfolge von Sickervorgängen. Durch einen Vergleich mit experimentellen Daten wird gezeigt, dass das Modell das Kugelfließen präzise abbilden kann.

Spatially resolved modelling of the fission product behaviour in a HTR-core with spherical or prismatic fuel elements

by

Dipl.-Ing. André Xhonneux

Abstract:

One of the most important aspects during the licensing procedure of nuclear facilities is the release of radioactive isotopes. The transport from the origin to the environment is called release chain. In the scope of this work, the spatially distributed fission product release from both spherical and prismatic fuel elements, the transport with the coolant as well as the deposition on reactor internals are simulated in detail.

The fission product release codes which were developed at Forschungszentrum Jülich are analyzed, shortcomings are identified and resolved. On this basis, a consistent simulation module, named STACY, was developed, which contains all capabilities of the stand-alone codes and at the same time exceeds the methodology towards new aspects. The physics models were extended, for example to take the radial temperature profile within the fuel element and the realistic time-dependent nuclide inventory into account.

A central part of this work is the automated treatment of the release behavior of a representative number of fuel elements. This allows for a spatially resolved release calculation, where an individual release rate is calculated for each space region. The coupling with the depletion code *Topological Nuclide Transmutation (TNT)* allows for conducting an individual depletion calculation for each considered fuel element. It is shown, that the released inventory is representative for a certain number of fuel elements. By using this model, the fission product release is being studied for a reference plant (HTR-Modul). Both the releases from the equilibrium core as well as the release during a core heat-up after a fast depressurization accident are being studied. In comparison to former studies, the cumulative release of long-lived nuclides during the core heat-up phase is lower and the release of short-lived nuclides is about two times higher.

The release calculation can also be conducted for prismatic fuel elements (e.g. those of the Japanese HTTR). In this case, for each fuel element the depletion and release behavior of a representative compact is being determined.

Furthermore, a new pebble flow model *Software for Handling Universal Fuel Elements (SHUFLE)* has been developed, which allows for modeling the pebble flow more in detail within the framework of a multi-physics code package. The model describes the movement of smaller fuel element clusters as a sequence of seepage processes. With the help of experimental data, it is demonstrated that the model can depict the pebble fuel in detail.

Inhaltsverzeichnis

NOMENKLATUR	III
EINLEITUNG	1
1 STAND DES WISSENS	3
1.1 Spaltproduktfreisetzungverhalten eines HTR	3
1.1.1 Freisetzung aus Partikeln und Brennelementen	3
1.1.2 Staubgebundene Freisetzung aus dem Core	5
1.1.3 Auslegung des Referenzbrennelements	5
1.2 Reaktorkonzepte und Auswahl der modellierten Referenzanlagen	6
1.3 Freisetzungsrelevante Nuklide	13
1.4 Existierende Programme zur Spaltproduktfreisetzung kugelförmiger Brennelemente	15
1.4.1 FRESCO-I	15
1.4.2 FRESCO-II	16
1.4.3 PANAMA	21
1.4.4 SPATRA	23
1.5 Anwendung existierender Programme auf Compacts	24
1.6 Zielsetzung der Arbeit	27
2 PROGRAMMSYSTEM STACY	29
2.1 Entwicklung von STACY aus existierenden Einzelprogrammen	29
2.2 Verifikation von STACY an den Einzelprogrammen	31
2.3 Vergleich mit in Heiztests gemessenen Freisetzungsraten	32
2.4 Einbindung in das HTR Code Package	37
2.5 Modellerweiterungen in STACY	38
2.5.1 Berechnung des Temperaturprofils im Brennstoffpartikel	38
2.5.2 Berücksichtigung des Temperaturprofils im Brennelement	42
2.5.3 Verwendung des realen Nuklidinventars	48
2.5.4 Einbeziehung realer Schichtdickenverteilungen in die Bruchanteilrechnung	57
2.5.5 Verwendung der Realgasgleichung	65
2.5.6 Erweiterung von STACY auf zylinderförmige Compacts	67
3 ENTWICKLUNG EINES MODELLS ZUR RÄUMLICH AUFGELÖSTEN SPALTPRODUKTFREISETZUNGSRECHNUNG	75
3.1 Einführung in die räumlich aufgelöste Spaltproduktfreisetzung	75
3.2 Core-Auslegung mit VSOP	77
3.3 Modellierung des Brennstoffmanagements	81
3.3.1 Anwendung eines erweiterten Stromröhrenmodells in STACY	82
3.3.2 Entwicklung eines neuen Kugelfließmodells	90
3.4 Abbrandrechnung mit TNT	104
3.4.1 Berechnung der Nuklidinventare	105
3.4.2 Ermittlung der thermischen Brennelementleistung	108
3.4.3 Berücksichtigung der räumlichen Selbstabschirmung	113
3.5 Bestimmung der Gesamtfreisetzungsrate eines Kugelhaufencores	116
3.6 Simulation der Spaltproduktablagerung auf Reflektoren	118
3.7 Umverteilung der Spaltprodukte mit dem Kühlgas	121
3.8 Freisetzungsrechnung bei HTR mit prismatischen Brennelementen	124

4	HTR-MODUL-ANLAGENRECHNUNG	127
4.1	Berechnung des Gleichgewichtscores und Temperaturen im Druckentlastungsstörfall	127
4.1.1	Berechnung des Gleichgewichtscores.....	127
4.1.2	Berechnung der Brennelementtemperaturen in der Kernaufheizphase nach DLOFC.....	136
4.2	Spaltproduktfreisetzungsberechnungen	141
4.2.1	Verwendeten Daten	141
4.2.2	Spaltproduktfreisetzung des Gleichgewichtsberechnungen	145
4.2.3	Spaltproduktfreisetzung in der Kernaufheizphase nach DLOFC	151
4.3	Spaltproduktfreisetzung bei Auslegungsberechnungen des HTR-Modul.....	160
4.3.1	Variation der nominellen Durchlaufzahl	160
4.3.2	Erhöhung des Zielabbrands.....	166
5	HTTR-ANLAGENRECHNUNG	169
5.1	Neutronentransport- und Abbrandrechnung mit Serpent.....	169
5.2	Räumlich aufgelöste Freisetzungsberechnung	173
5.3	Vergleich der Ergebnisse mit früherer Studie.....	178
6	ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK	185
7	QUELLENVERZEICHNIS	189
	ANHANG	201

Nomenklatur

Abkürzungen

Abkürzung Bedeutung

AGR	Advanced Gas Reactor
ALARA	As Low As Reasonably Achievable
ANABEK	Analyse der Belastungen des Kernaufbaus (Versuchsstand)
ATR	Advanced Test Reactor (Materialtestreaktor am INL, USA)
AVR	Arbeitsgemeinschaft Versuchsreaktor
BISO	Bistructural-isotropic
CRP	Coordinated Research Program
DEM	Diskrete Elemente Methode
DES	Druckentlasteter Primärkreis
DLOFC	Depressurized loss of forced cooling
FIMA	Fissions per Initial Metal Atoms
FZJ	Forschungszentrum Jülich
GA	General Atomics, San Diego, USA
HFR	High Flux Reactor (Materialtestreaktor in Petten, Niederlande)
HRB	Hochtemperatur Reaktorbau GmbH
HTR	Hochtemperaturreaktor
HTTR	High-Temperature Engineering Test Reactor (Versuchsreaktor in Oarai, Japan)
IAEA	International Atomic Energy Agency
INET	Institute for Nuclear and New Energy Technology (Tsinghua Universität, Beijing, China)
INL	Idaho National Laboratory
ITU	Institut für Transurane (Karlsruhe, Deutschland)
JAEA	Japan Atomic Energy Agency
PyC	Pyrokohlenstoff (<i>Pyrocarbon</i>)
KüFA	Kühlfinger-Versuchsapparatur
LEU	Low enriched uranium
LOCA	Loss-of-coolant-accident
LWR	Leichtwasserreaktor
MEDUL	Mehrfachdurchlauf
MTR	Materialtestreaktor
NGNP	US-Amerikanischer HTGR, Konzept des US-DOE (<i>Next Generation Nuclear Plant</i>)
NWA	Nachwärmeabfuhr
OTTO	1-fach Durchlauf der Brennelemente (<i>Once through then out</i>)
OPF	Pro Spaltung freigesetzte Anzahl an Sauerstoffatomen (<i>Oxygen per Fission</i>)
ORNL	Oak Ridge National Laboratory
PBMR	Pebble Bed Modular Reactor
PIE	Nachbestrahlungsuntersuchung (<i>Post Irradiation Examination</i>)
SiC	Siliziumkarbid (<i>Silicon Carbide</i>)
THTR	Thorium High Temperature Reactor

TRISO	Tristructural Isotropic Coating
UCO	Uranium oxycarbide (Mischung aus UO_2 und UC_2)
V-HTR	Zukünftiges HTR Konzept der Generation IV (<i>Very High Temperature Reactor</i>)
VLT	(Äquivalente) Volllasttage (EFPD)

Rechenprogramme

<u>Bezeichnung</u>	<u>Bedeutung / Kurzbeschreibung</u>	<u>Entwickler</u>
CFX	kommerzielles Computational Fluid Dynamics Programm	ANSYS
CITATION	Nuclear Reactor Core Analysis Code (Neutronenflussberechnung)	ORNL
FRESCO-I	Spaltproduktfreisetzung aus einem Kugelhaufen-HTR-Core	FZJ
FRESCO-II	Spaltproduktfreisetzung aus einem Kugelbrennelement	FZJ
GETTER	Spaltproduktfreisetzung aus einem Kugelbrennelement	HRB
FORNAX	Spaltproduktfreisetzung aus einem HTR mit prismatischen BE	JAEA
FIPREX	Fission Product Release under Accident (X) Conditions	PBMR
FUMAN	Fuel Management Code in VSOP	FZJ
HCP	HTR Code Package (Multiphysikalisches HTR-Programmpaket)	FZJ/RWTH
MGT-3D	Multi Group Tinte 3D (transiente Störfallberechnung)	FZJ
ORIGEN	Oak Ridge Isotope Generation	ORNL
ORIGEN-Juel	Adaptierte Version von ORIGEN zur VSOP nachgelagerten detaillierten Abbrandrechnung	FZJ
PANAMA	Partikelbruch Nabielek Martin	FZJ
PARFUME	Particle Fuel Model	INL
TNT	Topological Nuclide Transmutation (Abbrandcode)	FZJ
SHUFLE	Software for Handling of Universal Fuel Elements	FZJ/RWTH
SLIPPER	Freisetzung metallischer Spaltprodukte aus einem Kugelbrennelement	FZJ
SORS	Spaltproduktfreisetzung aus einem Core mit prismatischen Brennelementen	GA
SPATRA	Ablagerung von Spaltprodukten auf metallische Oberflächen	FZJ
STADIF	Stationäre Diffusion aus Kugelbrennelementen	FZJ
STAR	Source Term Aerosol Resuspension	LRST
THERMIX	Fluidodynamik im HTR	FZJ
TOTMOS	Spektralcode	FZJ
VSOP	Very Superior Old Programs	FZJ
ZIRKUS	Nukleare und fluiddynamische Auslegung von HTR	Interatom

Lateinische Formelzeichen

<u>Zeichen</u>	<u>Bedeutung</u>	<u>Einheit</u>
A	- Oberfläche (geometrisch)	$[\text{m}^2]$
a	- Kohäsionsdruck	$[\text{Pa} \cdot \text{m}^6]/\text{mol}^2$
A	- Schwermetallabbrand	$[\text{MWd}/t_{\text{SM}}]$
A_{Grund}	- Grundfläche der Masche	$[\text{m}^2]$
A_{Lat}	- laterale Begrenzungsfläche der Masche	$[\text{m}^2]$
$a_{\text{U-235}}$	- Urananreicherung	$[\text{gew.} \cdot \%]$
b	- Kovolumen	$[\text{m}^3/\text{mol}]$
c	- Wärmekapazität	$[\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})]$

c	- Konzentration	$[\text{mol}/\text{m}^3]$
c_0	- Anfangskonzentration	$[\text{mol}/\text{m}^3]$
c_{Sp}	- Spaltproduktkonzentration	$[\text{mol}/\text{m}^3]$
$c_{\text{Sp,Masche},i}$	- Spaltproduktkonzentration in der Masche „i“	$[\text{mol}/\text{m}^3]$
D	- Diffusionskoeffizient	$[\text{m}^2/\text{s}]$
$D_{0,i}$	- Frequenzfaktor	$[\text{m}^2/\text{s}]$
D_{BE}	- Kugeldurchmesser	$[\text{m}]$
D_{Hyd}	- hydraulischer Durchmesser	$[\text{m}]$
D_i	- Diffusionskoeffizient in der Schale „i“	$[\text{m}^2/\text{s}]$
D_{Sp}	- binärer Diffusionskoeffizient	$[\text{m}^2/\text{s}]$
E_A	- Aktivierungsenergie	$[\text{J}/\text{mol}]$
E_f	- Mittlere Spaltleistung je gespaltenes Atom	$[\text{J}/\text{Atom}]$
$f_{i \rightarrow \text{Isotop}}$	- Übergangsrate von einem Vorläufernuklid zu dem betrachteten Nuklid	
FR	- Freisetzungsrates	$[\text{mol}/\text{s}]$
$\text{FR}_{\text{CP,Def},i}$	- Freisetzungsrates eines Partikels der Defektpartikelcharge „i“	$[\text{mol}/\text{s}]$
$\text{FR}_{\text{CP,Int}}$	- Freisetzungsrates eines intakten Partikels	$[\text{mol}/\text{s}]$
FR_{Grain}	- Freisetzungsrates eines repräsentativen Graphitkorns	$[\text{mol}/\text{s}]$
$\text{FR}_{\text{Puffer}}$	- freigesetztes Pufferinventar beim Partikelversagen	$[\text{mol}]$
f_{MKugel}	- Abzogener Anteil markierter Kugeln	
f_{SG}	- Spaltgasfreisetzunganteil	
$f_{\text{U-235}}$	- U-235-Anteil im Partikelkern bezogen auf die Gesamtmenge im Brennelement	$[\text{W}]$
$f_{\Delta T_j}$	- Volumenanteil der Temperaturdifferenzklasse „j“	
h_{Zyl}	- Höhe des Zylinders	$[\text{m}]$
J	- Diffusionsstrom	$[1/(\text{m}^2 \cdot \text{s})]$
$J_0(x)$	- Bessel-Funktion vom Typ eins und der Ordnung null	
k_B	- Boltzmann-Konstante ($= 1,3806488(13) \text{ J/K}$)	$[\text{J}/\text{K}]$
M	- Molmasse	$[\text{g}/\text{mol}]$
n	- Anzahl Temperaturbereiche ($n = 1, 2$)	
n	- Anzahl Chargen Defektpartikel	
N	- Stoffmenge	$[\text{mol}]$
N	- Verhältnis Thorium zu Uran	
N_A	- Avogadro-Konstante	$[\text{Atome}/\text{mol}]$
$n_{\text{K,Masche}}$	- Anzahl Brennelemente in der Masche	
n_{Ch}	- Anzahl Kanäle	
$n_{\text{CP,Def},i}$	- Anzahl Defektpartikel in der Defektpartikelcharge „i“	
$n_{\text{CP,Int}}$	- Anzahl Defektpartikel	
n_{CPs}	- Anzahl Partikel im Brennelement	
$n_{\text{Durchlauf}}$	- Gesamtanzahl Durchläufe	
n_{Grain}	- Anzahl repräsentativer Graphitkörner	
Inv_i^k	- Inventar des Vorläufernuklids im Partikelkern zu Beginn des Zeitschritts	$[\text{mol}]$
$n_{\text{BE,Zonen}}$	- Anzahl Zonen bei der Berechnung des Temperaturprofils	
n_K	- Gesamtanzahl abzogener Kugeln	
n_{Maschen}	- Anzahl Maschen im Core	

n_{Reg}	- Anzahl Regionen	
$n_{\text{Reg},j,i}$	- Anzahl Regionen im Kanal beim i-ten Durchlauf des j-ten Gesamtweges	
n_{TB}	- Anzahl Tracer-Brennelemente	
n_{TK}	- Anzahl abgezogener Testkugeln /markierter Kugeln	
OPF	- Sauerstoffatome pro Spaltung	
p	- Wahrscheinlichkeit	
p_c	- kritischer Druck	[N/m ²]
p_{HE}	- Kühlgasdruck	[N/m ²]
p_i	- Partialdruck	[N/m ²]
$p_{\text{th,Masche},i}$	- mittlere Leistungsdichte in der Masche der Masche „i“	[W/m ³]
q_i	- nukleare Leistungsdichte	[W/m ³]
\dot{Q}_{Korngr}	- kontaminationsbedingter Quellterm auf den Korngrenzen [mol/s]	[mol/s]
Q_{ad}	- Penetrationsstoffstrom	[mol/s]
\dot{Q}_{BE}	- integraler Quellterm für ein BE	[mol/s]
$\dot{Q}_{\text{CP-Kern}}$	- Quellterm im Partikelkern	[mol/s]
\dot{Q}_{Konv}	- Wärmeabfuhrate durch Konvektion	[W]
\dot{Q}_{λ_s}	- Wärmeabfuhrate aufgrund der effektiven Wärmeleitung im	[W]
r	- Radius ($R_i \leq r \leq R_a$)	[m]
r	- radiale Begrenzung der Masche	[m]
r_i	- Innenradius der Masche	[m]
r_A	- Außenradius der Masche	[m]
R_a	- Außenradius des Körpers	[m]
$R_{a,k}$	- Außenradius des Kanals an der Kugelschüttungsoberfläche	[m]
R_{BE}	- Brennelementradius	[m]
R_{Core}	- Außenradius der Kugelschüttung	[m]
r_{CP}	- Radius des Partikels	[m]
$r_{\text{CP-Kern}}$	- Kernradius	[m]
R_G	- universelle Gaskonstante	[J/(mol·K)]
R_i	- Innenradius	[m]
$R_{i,k}$	- Innenradius des Kanals an der Kugelschüttungsoberfläche	[m]
R_{Recoil}	- Recoilreichweite	[m]
Sc	- Schmidtzahl	
Sh	- Sherwoodzahl	
t	- Zeit	[s]
T	- Temperatur	[K]
t_B	- Bestrahlungszeit	[s]
T_B	- mittlere Bestrahlungstemperatur	[K]
T_c	- kritische Temperatur	[K]
T_{Gas}	- Gastemperatur	[K]
t_i	- Nennmaß einer Schichtdickenklasse	[μm]
t_{VW}	- mittlere Verweilzeit	[VLT]
u	- vertikale Geschwindigkeitskomponente	[m/s]
v	- radiale Geschwindigkeitskomponente	[m/s]
v_{\perp}	- Auftreffgeschwindigkeit der Teilchen auf die Wand	[m/s]

$V_{CP-Kern}$	- Volumen des Partikelkerns	$[m^3]$
V_{innen}	- Volumen der inneren Schale einer Brennstoffelementzone „k“	$[m^3]$
$V_{au\ddot{a}u\ddot{e}n}$	- Volumen der äußeren Schale einer Brennstoffelementzone „k“	$[m^3]$
V_M	- molares Volumen	$[m^3/mol]$
V_{masche}	- Maschenvolumen	$[m^3]$
V_{puffer}	- Leervolumen in der Pufferschicht	$[m^3]$
$V_{Reg,Ch,i}$	- Volumen einer Region in Kanal „i“	$[m^3]$
$V_{Region,i}$	- Gesamtvolumen der Region „i“	$[m^3]$
V_{UC}	- umgewälztes Corevolumen	$[m^3]$
$V_{Umgebung}$	- dem Körper umgebenden Volumen	$[m^3]$
$V_{Zylinder}$	- Zylindervolumen	$[m^3]$
$V_{Simpson}$	- Volumen des drehzylindrischen Körpers	$[m^3]$
$X_{i,j}$	- Anteil der Region „i“ an Masche „j“	
$X_{j,i}$	- Anteil der Masche „i“ an Region „j“	
$Y_0(x)$	- Bessel-Funktion vom Typ zwei und der Ordnung null	
z	- axiale Begrenzung der Masche	$[m]$
$z_{DZK,0}$	- obere vertikale Begrenzung des drehzylindrischen Körpers	$[m]$
$z_{DZK,1}$	- untere vertikale Begrenzung des drehzylindrischen Körpers	$[m]$
Δt	- Zeitschrittweite	$[s]$
Δt_i	- Breite einer Schichtdickenklasse	$[\mu m]$

Griechische Formelzeichen

<u>Zeichen</u>	<u>Bedeutung</u>	<u>Einheit</u>
α	- Haftkoeffizient	
α_l	- longitudinale Dispersivität	$[m^2/s]$
α_n	- Nullstellen	
α_T	- transversale Dispersivität	$[m^2/s]$
β	- Adsorptionskoeffizient	
β	- Penetrationskoeffizient	
γ	- Spaltproduktausbeute	
ϵ	- örtlicher Leervolumenanteil (Leerraumfaktor)	
ϵ/K	- Stoffkonstanten (Lennard-Jones-Parameter)	$[K]$
ϵ_{Refi}	- mittlerer Leervolumenanteil im Reflektor	
λ	- Zerfallskonstante	$[1/s]$
λ_i	- Wärmeleitfähigkeit	$[W/(m \cdot K)]$
μ_i	- Erwartungswert einer Schichtdicke	$[\mu m]$
σ	- Materialdichte	$[kg/m^3]$
σ	- Teilchendurchmesser	$[A]$
σ_a	- Absorptionsquerschnitt	$[barn]$
σ_f	- Spaltquerschnitt	$[barn]$
σ_i	- Standardabweichung einer Schichtdicke	$[\mu m]$
$\phi(E,t)$	- Energie- und zeitabhängiger Neutronenfluss	$[n/(m^2 \cdot s)]$

Subskripte

<u>Zeichen</u>	<u>Bedeutung</u>
arithm	- arithmetisch
Anfang	- Zustand am Anfang des Betrachtungsraumes / Intervalls
Ch	- Kanal
Ende	- Zustand am Ende des Betrachtungsraumes / Intervalls
ges	- Gesamtwert
geom	- geometrisch
He	- Helium
i	- laufender Index
In	- Innen
j	- laufender Index
Grain	- Graphitkörner
k	- laufender Index
Max	- Maximalwert
Min	- Minimalwert
Partikel	- Partikelkern
Reg	- Region
Rel	- Relativ
SG	- Spaltgas
SP	- Spaltprodukt
t	- laufender Index

Einleitung

Auf Grund des weltweit steigenden Energiebedarfs ist es unrealistisch anzunehmen, dass nicht alle zur Verfügung stehenden Primärenergieformen auch genutzt werden. Dabei sollen die drei Aspekte einer nachhaltigen Energiewirtschaft, nämlich Ökonomie, Ökologie und Sozialverträglichkeit, die durch jede Primärenergieform in unterschiedlicher Weise erfüllt werden, für das Gesamtsystem in Einklang gebracht werden. Aus diesem Grund wird die friedliche Nutzung der Kernenergie von vielen Ländern fortgesetzt oder sogar neu aufgenommen. Weltweit sind aktuell 65 Anlagen im Bau und weitere 160 in der Planung [WNA2012].

Neue Anlagenkonzepte der Generation III und III+ versuchen, das sogenannte Restrisiko für einen Störfall mit katastrophalen Folgen durch die verstärkte Verwendung passiver Komponenten zu verringern. Bei Reaktorkonzepten der Generation IV, bei denen die Nachhaltigkeitsindikatoren im Vergleich zu bestehenden Reaktorkonzepten besser erfüllt sein sollen [GIF2002], spielt der mit Helium gekühlte Hochtemperaturreaktor (HTR) eine wichtige Rolle. Der Einsatz eines Brennstoffs, bei dem der Spaltstoff in kleinen Brennstoffpartikeln vorliegt, sowie die Verwendung eines inerten Kühlgases ermöglicht eine im Vergleich zu allen anderen vielleicht mit Ausnahme solarthermischer Kraftwerke höhere Kühlmittelaustrittstemperatur weit über 800°C hinaus. Dabei können die Partikel sowohl in Graphitkugeln (Kugelhaufen-HTR) eingebettet als auch in zylinderförmigen Compacts (prismatischer HTR) verwendet werden. Alleinstellungsmerkmal des HTR ist die Möglichkeit der Erzeugung von Prozesswärme auf hohem Temperaturniveau, die in diversen industriellen Prozessen genutzt werden kann. Bei angemessener Auslegung verfügt der HTR über eine Vielzahl passiver Sicherheitsmerkmale, wie z. B. die Abfuhr der Nachzerfallsleistung ohne aktive Kühlmaßnahmen. Durch eine relativ geringe Leistungsdichte von ca. 2-6 MW/m³ und großer Mengen von Graphit im Core¹, kann eine Kernschmelze physikalisch bedingt nicht eintreten. Auch in allen anderen denkbaren Störfällen bleiben die Brennstofftemperaturen niedrig genug, um das Spaltproduktinventar weitgehend in den Partikeln zurückzuhalten. Offene Fragestellungen bestehen jedoch noch in Zusammenhang mit Luft- und Wassereinbruchsszenarien. Speziell das Spaltprodukttransportverhalten aus dem Core ist Bestandteil aktueller Forschungs- und Entwicklungsarbeiten.

Die Quantifizierung der Freisetzung von Radionukliden, die über einen komplexen Transportpfad erfolgt, ist von zentraler Bedeutung für die sicherheitstechnische Bewertung des HTR. Im Normalbetrieb werden Nuklide aus den Brennelementen freigesetzt. Bei einer Druckentlastung des Primärkreises wird ein Teil des während des Normalbetriebs abgelagerten Staubs von den Oberflächen abgelöst und zusammen mit den nicht staubgebundenen Nukliden im Kühlgas in das Reaktorgebäude freigesetzt. Nach der Druckentlastung werden dann aufgrund erhöhter Temperaturen weitere Radionuklide aus den Brennelementen freigesetzt. Ein wichtiger Aspekt dieses Transportpfades ist auch das Gas- und Staubverhalten im Reaktorgebäude bzw. der Austrag in die Umgebung. Generelles Ziel ist es, die Spaltproduktfreisetzung aus den Brennelementen wie auch Ablagerungen von Spaltprodukten auf Bauteilen soweit wie mit vertretbarem Aufwand möglich zu minimieren (as-low-as-reasonable-achievable, ALARA), um die Strahlenbelastung beim Betrieb des Reaktors, aber auch bei Wartung und Inspektion, so gering wie möglich zu halten.

¹ Um eine Verwechslung mit dem Partikelkern zu vermeiden, wird für die Bezeichnung des Reaktorkerns grundsätzlich Core verwendet

Die in der Vergangenheit am Forschungszentrum Jülich entwickelten und eingesetzten Rechenprogramme weisen diesbezüglich Einschränkungen auf. So wurde bisher nur eine rudimentäre konservative Abschätzung der Spaltproduktfreisetzung vorgenommen. Dazu wurde lediglich das Freisetzungsverhalten ausgewählter Kugeln berechnet, die der höchsten Temperatur und einer hohen schnellen Neutronenfluenz ausgesetzt sind. Mit Hilfe dieser Daten wurde eine Hochrechnung des Freisetzungsverhaltens des gesamten Cores durchgeführt. Stringentere Vorgaben bezüglich der Freisetzung von Radionukliden in die Umgebung einerseits, als auch die Bestrebungen des ALARA-Prinzips andererseits, verlangen eine detaillierte Beschreibung der relevanten Phänomene. Hier genügt es nicht, nur wenige Brennelemente zu betrachten. Vielmehr wird eine räumlich hoch aufgelöste Simulation der Spaltproduktfreisetzung, bei der die lokalen Gegebenheiten im Core berücksichtigt werden, benötigt.

In der vorliegenden Arbeit werden Defizite in den vorhandenen Programmen zur Spaltproduktfreisetzung identifiziert und behoben. Im ersten Kapitel werden der Stand des Wissens dargestellt und die bisher verwendeten Programme beschrieben. Des Weiteren werden zwei HTR-Konzepte zur weiteren Untersuchung selektiert sowie die zu untersuchenden Nuklide definiert. Außerdem werden die erkannten Defizite bei den bestehenden Programmen zur Spaltproduktfreisetzung aufgezeigt. In Kapitel 2 werden die im ersten Kapitel entwickelten Verbesserungsvorschläge aufgegriffen und deren Umsetzung und Auswirkung beschrieben. Des Weiteren wird die Vorgehensweise bei der Kopplung bisheriger und neu entwickelter Programmteile zu einem Programmpaket und dessen Rolle in einem multiphysikalischen Programmpaket vorgestellt. Im darauffolgenden Kapitel werden die notwendigen Methoden, die eine räumlich aufgelöste Spaltproduktfreisetzungsberechnung bei Kugelhaufen-HTR ermöglichen, vorgestellt. Auf Grund seiner hohen Bedeutung wird das Kugelfließen näher untersucht und die Entwicklung eines neuen Modells zum Kugelfließen vorgestellt, das die Anforderungen nach Genauigkeit und vertretbarem Rechenaufwand erfüllt. In Kapitel 4 wird am Beispiel eines Kugelhaufen-HTR die Core-Auslegung mit Hilfe von Daten aus den Genehmigungsunterlagen nachvollzogen, um anschließend die berechneten Freisetzungsraten der radiologisch relevantesten Nuklide sowohl für das Gleichgewichtscore, als auch für die Kernaufheizphase zu diskutieren. Im gleichen Kapitel werden Variationen dieses Kugelhaufen-HTR betrachtet und die Auswirkungen auf die Freisetzungsraten vorgestellt. Im Kapitel 5 wird das Freisetzungsverhalten eines prismatischen HTR unter Normalbetriebsbedingungen vorgestellt. Abschließend werden im letzten Kapitel die erarbeiteten Ergebnisse zusammengefasst sowie mögliche Schwerpunkte für zukünftige Forschungs- und Entwicklungsarbeiten aufgezeigt.

1 Stand des Wissens

1.1 Spaltproduktfreisetungsverhalten eines HTR

Die Kenntnis der Normalbetriebsfreisetzung und –ablagerung von Spaltprodukten ist für Störfallanalysen von erheblicher Bedeutung, da diese Aktivitäten insbesondere bei kleinen HTR einen wesentlichen Beitrag zum störfallbedingten Quellterm liefern können [VDI1989].

Klassisch wird der Transport von Spaltprodukten durch einen Fick'schen Ansatz beschrieben [IAE1997]. Das einfache Fick'sche Diffusionsmodell versucht mit effektiven Diffusionskoeffizienten das reale Freisetungsverhalten phänomenologisch abzubilden. Dabei wird versucht, so realitätsnah wie möglich zu rechnen und gleichzeitig hinreichend konservativ bei den Ergebnissen zu bleiben.

Bei der Spaltproduktfreisetzung spielen verschiedene Mechanismen eine Rolle [RAG1983]. Bei dem Referenzbrennelement dominiert die Freisetzung aufgrund von Kontaminationen der Graphitmatrix und Defektpartikel bis zu einer Brennelementtemperatur von zirka 1.100°C. Erst oberhalb von zirka 1.100°C setzt die noch geringe Diffusion aus intakten Partikeln ein. Bei einer Brennelementtemperatur höher als zirka 1.600°C setzt die Korrosion der SiC-Schicht signifikant ein und oberhalb von etwa 2.000°C beginnt die thermische Zersetzung dieser Schicht.

Verschiedene Autoren berichten allerdings, dass das Freisetungsverhalten von Caesium (Cs) nicht genügend gut mit dem einfachen Fick'schen Diffusionsmodell beschrieben werden kann [KRA1991]. Andere Freisetzungsmodelle versuchen dementsprechend Physik und Chemie auf der mikroskopischen Skala zu beschreiben. Hier ist zu unterscheiden zwischen Modellen, die die zweiphasige Fick'sche Diffusion nutzen [LEY1995], und Modellen, die die einzelnen Prozesse auf kleinster Ebene zu modellieren versuchen [KRA1991]. Letztere scheitern meistens daran, dass die Stoffdaten und weitere Eingangsgrößen nur bedingt gemessen oder bestimmt werden können. Simulierte Daten werden vermehrt über zusätzliche freie Parameter an die Versuche angeglichen. Allerdings stellt sich häufig heraus, dass diese freien Parameter von Versuch zu Versuch adaptiert werden müssen, um die Ergebnisse zu treffen. Demnach ist die Vorhersagekraft und der Mehrwehrt solcher detaillierter Modelle mehr als fraglich.

1.1.1 Freisetzung aus Partikeln und Brennelementen

Bei geringen Brennstofftemperaturen, bei denen Diffusion aus intakten Partikeln noch keine nennenswerte Rolle spielt, kommen zusätzlich Effekte zum Tragen (siehe Abbildung 1.1). Die bei der Kernspaltung freiwerdende Energie wird hauptsächlich von den Spaltprodukten hauptsächlich als kinetische Energie abgeführt. Nach der Spaltung legen die Spaltprodukte einen geringen Weg zurück (~einige μm), bis sie vom umgebenden Material zum Stillstand gebracht werden. Dabei kann in Randnähe eine Schichtgrenze spontan durchdrungen werden. Die Länge dieser Recoilstrecke ist vom Spaltprodukt selbst und dem umgebenden Material abhängig. Die Menge an Spaltprodukten, welche durch Recoilprozesse freigesetzt wird, ist eine rein geometrieabhängige Größe. Dicht an der Oberfläche entstehende Spaltprodukte können somit durch *Recoil* direkt freigesetzt werden. Beim *Knock-out* werden Spaltprodukte durch einen elastischen Stoß mit einem bei der Spaltung entstandenen Fragment oder einem energetischen Partikel herausgeschlagen [LEW1986]. Die durch diesen Effekt freigesetzte Menge ist jedoch vergleichsweise gering [LEW1986].

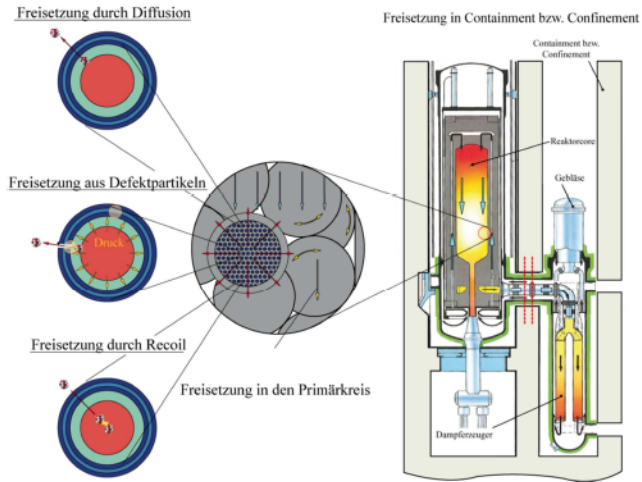


Abbildung 1.1: Freisetzungsmechanismen im Kugelhaufen
(links: TRISO-Partikel, rechts: Primärkreis des HTR-Modul [SIE1988b])

Um die Strahlenbelastung in der Umgebung beurteilen zu können, müssen nachgelagerte Glieder in der Freisetzungskette, wie z. B. Freisetzung aus dem Primärkreis in das Reaktorgebäude bzw. vom Reaktorgebäude in die Umgebung, berücksichtigt werden (siehe Abbildung 1.2). Im Rahmen dieser Arbeit wird dieser Teil der Freisetzungskette jedoch nicht betrachtet.

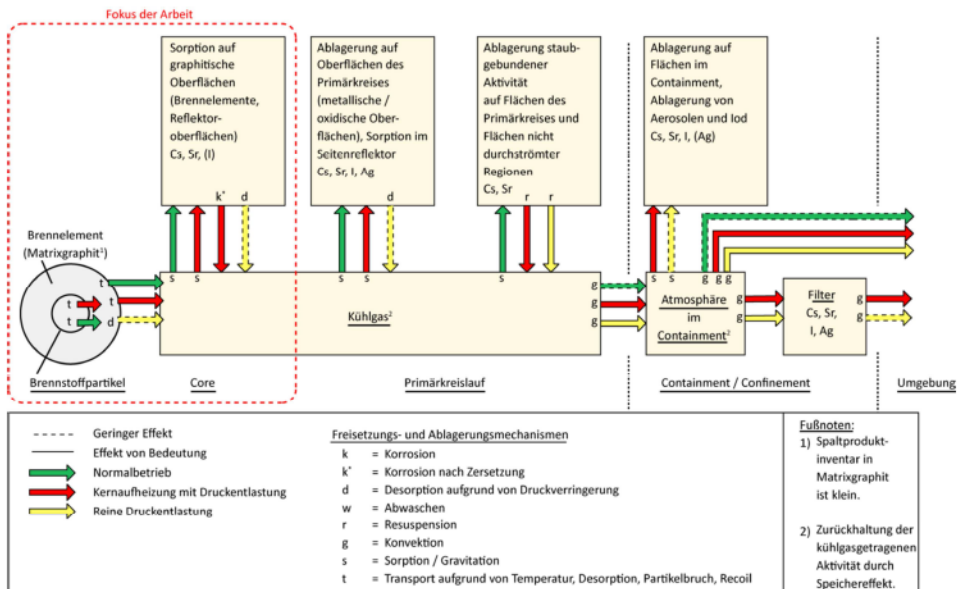


Abbildung 1.2: Transportphänomene im Hochtemperaturreaktor [MOO1987] (eigene Darstellung)

1.1.2 Staubgebundene Freisetzung aus dem Core

Kohlenstoffstaub kann im Primärkreis des HTR sowohl auf mechanischem, als auch auf chemischem Wege entstehen [JUE2011]. Durch Relativbewegungen zwischen Oberflächen kann aufgrund der Reibung Staub gebildet werden, wenn mindestens einer der Körper aus elementarem Kohlenstoff besteht [JUE2011]. Eine Bildung von Kohlenstoffstaub durch chemische Reaktionen zwischen Brennelementgraphit und Verunreinigungen im Kühlgas kann auf verschiedenen Wegen erfolgen.

Große Unsicherheiten bestehen noch hinsichtlich der staubgetragenen Aktivität [VDI1989]. In [JUE2011] wird vereinfachend angenommen, dass die komplette Spaltproduktfreisetzung im Normalbetrieb staubgebunden vorliegt. In der HTR-Modul-Trendanalyse wurde ein bestimmter Anteil (20 des Strontium- und 5 des Caesium-Inventars) als staubgetragene Aktivität angesetzt [MOO1987]. Die Wechselwirkung von Spaltprodukten mit Kohlenstoffstaub ist komplex. Die Modellierung dieser Vorgänge ist nicht Gegenstand dieser Arbeit.

Hinsichtlich der Beladung des Kohlenstoffstaubes mit Spaltprodukten sind folgende Mechanismen zu unterscheiden [VDI1989]:

- Durch Brennelementabrieb entstandener Staub enthält zum Zeitpunkt der Entstehung die durch Matrixkontamination sowie Spaltproduktwiederanlagerung an Brennelemente gegebene Aktivitätskonzentrationen.
- Durch Wechselwirkung mit der gasgetragenen molekularen Aktivität wird der Staub beladen. Ähnliches kann durch Wechselwirkung mit plate-out-Aktivität geschehen, wenn der Staub sich auf kontaminierten Oberflächen ablagert.

Bei der Herstellung von Brennelementen werden tausende TRISO-Partikel mit hochreinem A3-Matrixgraphitpulver vermischt und einem Zusatz von 10 Bindersubstanz unter hohem Druck bei einer Temperatur von 1.950°C zu Kugelbrennelementen gepresst. Höhere Temperaturen während des Kugel- bzw. Brennelementherstellungsprozesses könnten zu einer signifikanten Schädigung der SiC-Beschichtung führen, was eine erhöhte Diffusion des Urans aus den Partikeln in die Matrix zur Folge hätte. Für eine vollständige Hochtemperaturgraphitisierung und Reinigung würden Temperaturen um 2.800°C benötigt [KIS2009].

1.1.3 Auslegung des Referenzbrennelements

Aufgrund jahrelanger Forschungs- und Entwicklungsarbeiten entstand ein Referenzbrennelement mit TRISO-beschichteten (*Tristructural Isotropic Coating*) Partikeln. Der Aufbau des Brennelements und Partikels ist in Abbildung 1.3 dargestellt. Der Partikelkern besteht aus niedrig angereichertem (*Low Enriched Uranium, LEU*) UO_2 . Die erste Beschichtung um diesen Kern ist eine relative dicke, poröse Pufferschicht geringer Dichte. Diese erste Beschichtung absorbiert die kinetische Energie der Spaltprodukte, nimmt entstehende Spaltgase auf und hält den Druck auf akzeptablem Niveau. Mit zunehmendem Abbrand und Bildung von neutroneninduzierten Poren schwillt der Brennstoffkern an. Eine weitere Aufgabe der Pufferschicht ist hier entsprechend Platz zu bieten. Die zweite Beschichtung, die innere PyC-Schicht (*IPyC*), ist für Gase undurchlässig und besteht aus Pyrokohlenstoff hoher Dichte. Die darauffolgende Siliziumkarbidschicht (*SiC*) ist die Hauptdiffusionsbarriere und bildet ein kleines druckfestes Containment. Hauptaufgabe dieser Schicht ist es, metallische Spaltprodukte zurückzuhalten. Eine weitere äußere Pyrokohlenstoffschicht (*OPyC*) dient ebenfalls zur

Rückhaltung von Spaltprodukten, soll aber vor allem die SiC-Schicht gegen äußere Einwirkungen schützen.

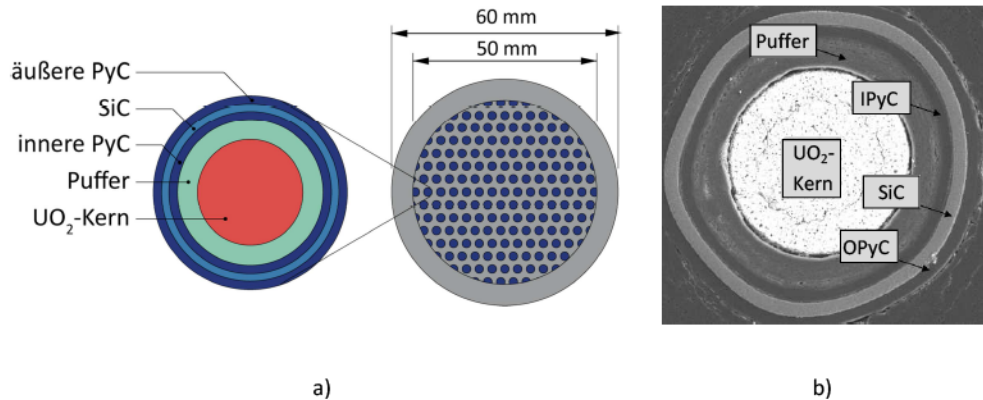


Abbildung 1.3: a) Aufbau des deutschen Referenzbrennelements
b) Schliffbild eines TRISO-Partikels unter dem Rasterelektronenmikroskop [FRE2010]

Die dominierende Quelle der Spaltproduktfreisetzung bei Normalbetrieb sind beschädigte Partikel. Eine Schädigung des Partikels kann herstellungsbedingt oder bestrahlungsbedingt sein. Aufgrund zu hoher Kräfte und / oder nachlassender Festigkeit kann Partikelversagen eintreten. Eine weitere wichtige Quelle ist die Uranverunreinigung im Matrixgraphit. Die bei Spaltung dieses Urans entstehenden Spaltprodukte können im Graphit nahezu ungehindert diffundieren.

1.2 Reaktorkonzepte und Auswahl der modellierten Referenzanlagen

Allen Hochtemperaturreaktoren gemein ist, dass der Brennstoff in Form von beschichteten Partikeln vorliegt, die in einer graphitischen Matrix eingebettet sind. Die Brennelemente können allerdings sowohl kugelförmig als auch in prismatischer Form vorliegen.

Abbildung 1.4 zeigt eine Übersicht der Hochtemperaturreaktoren, die in der Vergangenheit gebaut und betrieben wurden. Dabei sind der High-Temperature Engineering Test Reactor (HTTR) und HTR-10 zurzeit noch in Betrieb. Alle bisher gebauten und betriebenen Reaktoren (mit Ausnahme des Thorium-Hochtemperaturreaktor, THTR und des Fort. St. Vrain) waren bzw. sind Forschungsreaktoren. Sie haben zu den heute diskutierten HTR-Konzepten maßgeblich beigetragen. Die beim Anlagenbetrieb gewonnenen Erfahrungen wurden in zahlreichen Dokumenten, wie z. B. [BEC2010] festgehalten, um diese bei aktuellen und zukünftigen Konzepten zu berücksichtigen. An dieser Stelle folgt eine Übersicht mit den Eckdaten einiger HTR, da für ein gutes Verständnis der vorliegenden Arbeit eine Reihe von Angaben zu den Anlagen unerlässlich sind. Abschließend werden zwei Anlagen ausgewählt, die als Referenzanlage für diese Arbeit dienen.

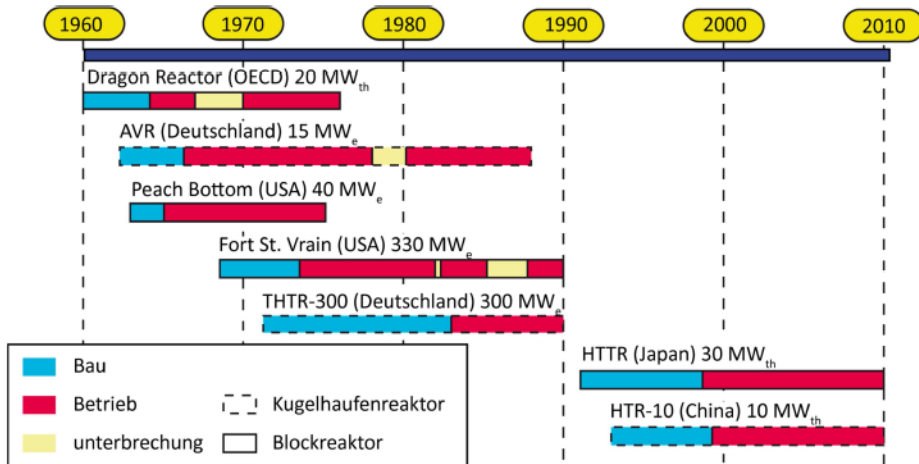


Abbildung 1.4: Hochtemperaturreaktoren in der Vergangenheit [NN2012] (eigene Darstellung)

Arbeitsgemeinschaft Versuchsreaktor (AVR)

Der AVR (*Arbeitsgemeinschaft Versuchsreaktor*) wurde von 1967 bis 1988 in unmittelbarer Nähe zum Forschungszentrum Jülich betrieben. Die Anlage war der erste Kugelhaufenreaktor weltweit. Hauptziel der Anlage waren die Demonstration des HTR-Konzeptes mit Kugelhaufen, die Erprobung und Weiterentwicklung von kugelförmigen HTR-Brennelementen [SCH1966, HAE1971] und der Test von Anlagenkomponenten. Mit Hilfe des AVR konnten einige passive Sicherheitsmerkmale der HTR-Technik nachgewiesen werden [ZIE1997]. Diese Erfahrungen wurden unmittelbar für den Bau des THTR und die Konzeptionierung des HTR-Modul genutzt und sind für die Entwicklung zukünftiger HTR von großer Bedeutung [VDI1989]. Speziell für diesen Versuchsreaktor waren die nasenförmigen Einbauten aus Graphit zur Aufnahme der Regelstäbe und die Anordnung des Dampferzeugers oberhalb vom Core charakteristisch (siehe Abbildung 1.5).

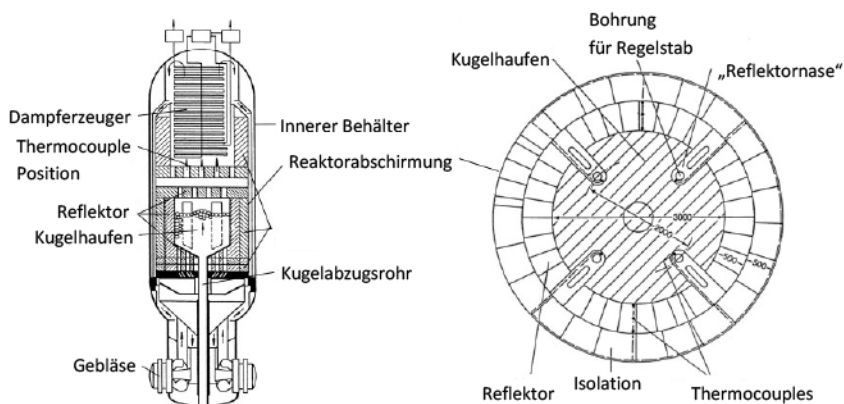


Abbildung 1.5: Vertikaler (links) und horizontaler Querschnitt (rechts) des AVR [VIL2008]

Vermutungen bestehen, dass diese Einbauten dazu geführt haben könnten, dass die gemessenen Brennstofftemperaturen zum Teil die vorhergesagte Temperatur bei den Melt-Wire-Experimenten übertrafen [SCH1989a, VDI1989]. Dies wurde von anderen Studien widerlegt. Diese haben gezeigt, dass diese Temperaturunterschiede auf bis dahin unberücksichtigte Bypass-Ströme zurückgeführt werden können [VIL2008]. Die Einbauten wirken sich allerdings negativ auf die Kugelfließgeschwindigkeitsverteilung im Core aus [POH2009]. Sie sind daher bei modernen HTR-Konzepten nicht mehr vorgesehen.

Obwohl viele unterschiedliche Experimente und (Ablagerungs-)Messungen am AVR durchgeführt wurden, lässt sich die Anlage aufgrund der Vielzahl verschiedener Brennelement-Varianten unterschiedlicher Güte hinsichtlich Spaltproduktückhaltefähigkeit im Kern und der komplexen Betriebs-historie modelltechnisch nur bedingt abbilden. Die Zusammensetzung des AVR-Cores über die Betriebszeit ist in Abbildung 1.6 dargestellt. In der Legende werden die im AVR eingesetzten Brennelemente aufgeführt.

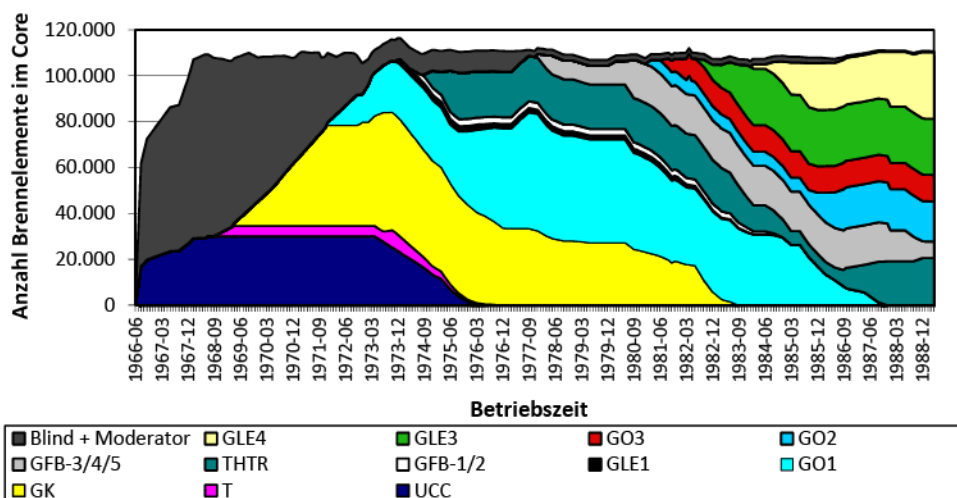


Abbildung 1.6: Zusammensetzung des AVR-Cores über die Betriebszeit [VER2007]

Das Erstcore enthält neben Brennstoffkugeln sowohl Moderator- (Kugeln ohne Brennstoff) als auch Absorberkugeln. Die hohen Sr-90-Freisetzungswerte konnten auf die karbidischen Brennelemente mit *BISO*-Beschichtung (*Bistructural-isotropic*) zurückgeführt werden [NAB2008]. Die räumliche Verteilung der Brennelemente über das Core ist mit großen Unsicherheiten behaftet. Demnach ist der AVR zur Validierung von Spaltproduktfreisetzungsprogrammen wenig geeignet.

Thorium-Hochtemperaturreaktor (THTR)

Der THTR-300 war mit einer thermischen Leistung von 750 MW als Prototypanlage für einen mittelgroßen, stromerzeugenden Hochtemperaturleistungsreaktor konzipiert. Bei dieser Anlage werden die Brennelemente an verschiedenen radialen Positionen dem Core zugeführt. Die Anlage wurde aus dem Bestreben gebaut, eine für einen Leichtwasserreaktor (LWR) übliche Wirtschaftlichkeit durch die Hochskalierung der Leistung zu erreichen. Zu jener Zeit wurde erwartet, dass HTR-Kraftwerke in Deutschland erst in einem Leistungsbereich von mindestens 1.000 MW_e wirtschaftlich

betreibbar seien [HAE1971]. Aufgrund der hohen Einheitsleistung und den damit verbundenen Dimensionen der Corekarverne von ca. 6 m Höhe und ca. 6 m Durchmesser steigt die Brennstofftemperatur unter Störfallbedingungen erheblich über die Temperaturen von modularen Konzepten an. Ein besonderes Kennzeichen der Anlage ist der Druckbehälter aus vorgespanntem Beton mit integrierter Anordnung der Primärkreiskomponenten. In Kombination mit dem auf der Innenseite angebrachten gasdichten, wassergekühlten Liner (siehe Abbildung 1.7) ist damit im Störfall eine weitgehende Rückhaltung der freigesetzten Aktivität gewährleistet. Dieser Behältertyp wird aufgrund seiner Konstruktion als berstsicher betrachtet. Aufgrund des großen Coredurchmessers war es bei diesem Reaktorkonzept notwendig, die Steuerstäbe des primären Abschaltsystems zum Teil direkt in die Kugelschüttung einzufahren. Ein sekundäres Abschaltsystem ist durch Steuerstäbe gegeben, die im Seitenreflektor verfahren werden. Die Anlage hat gezeigt, dass der direkte Kontakt zwischen Steuer- und Abschaltstäben mit der Kugelschüttung zu einem unerwartet hohen Kugelbruchanteil und zusätzlicher Staubbildung führt. Im Jahre 1989 wurde die Anlage nach nur 423 Volllasttagen (VL7) aufgrund technisch-wirtschaftlicher sowie politischer Gründe stillgelegt [KNI1993, NN2012a]. Der THTR befindet sich seit 1997 im sicheren Einschluss.

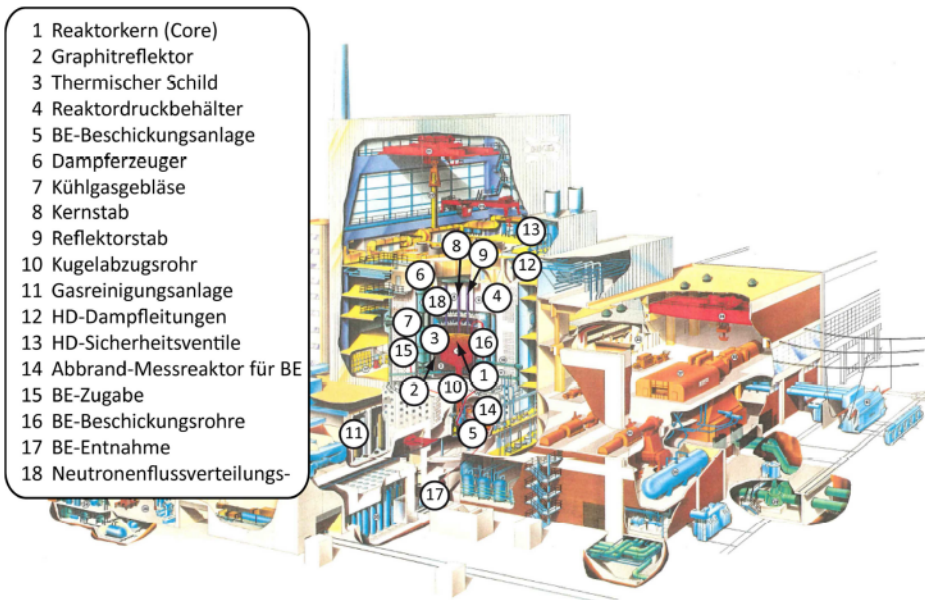


Abbildung 1.7: Schematische Darstellung des THTR-300 [BBC1982] (überarbeitet)

HTR-Modul

Der HTR-Modul hat eine thermische Leistung von 200 MW je Core. Bei diesem modularen Konzept wird die Gesamtleistung, die an einem Standort benötigt wird, auf entsprechend viele Reaktorkores aufgeteilt. Der HTR-Modul ist als Doppelblock-Anlage konzipiert worden, bei der zwei Reaktorkores über jeweils einen eigenen Dampferzeuger mit einer gemeinsamen Dampfturbine gekoppelt sind (siehe Abbildung 1.8). Im Nennleistungsbetrieb und bei einem Wirkungsgrad von 40 % liefert die Doppelblock-Anlage 160 MW an elektrischer Leistung. Obwohl die Anlage nie realisiert wurde, gilt das Design weltweit als Referenzanlage für zukünftige modulare Hochtemperaturreaktoren. Des Weiteren ist dieses Konzept gut analysiert und dokumentiert.

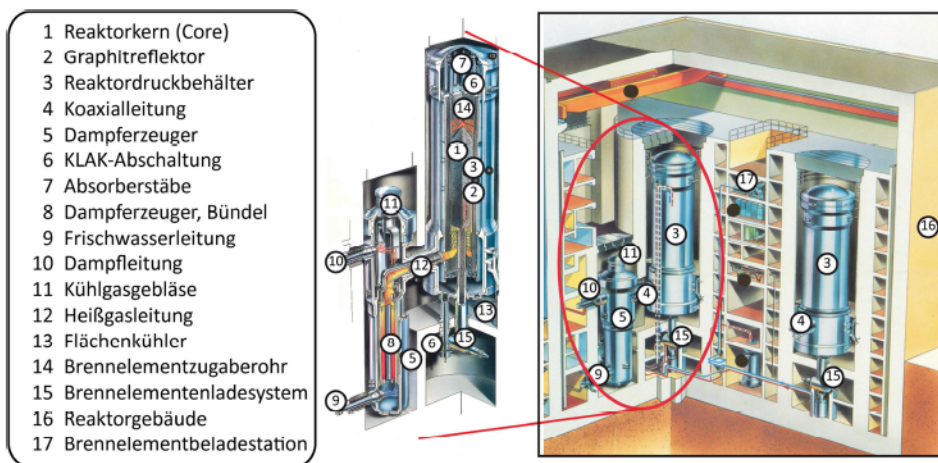


Abbildung 1.8: Schematische Darstellung des HTR-Modul [NN1988] (überarbeitet)

Eine der wichtigsten Leitlinien bei der Konzipierung des HTR-Modul war die Forderung, dass in allen zugrunde zu legenden Anlagenzuständen, auch in den Bereich hypothetischer Störfälle hinein, die Spaltproduktfreisetzung aus den Brennelementen hinreichend niedrig ist, um auch ohne dichtes Reaktorgebäude die Grenzwerte der Strahlenschutzverordnung sicher einzuhalten [RAG1983]. Für die HTR-Modul Kraftwerksanlage wurde bei der Konzipierung eine vereinfachte Containment-Philosophie verfolgt. Diese Forderung führt zwangsläufig zu einer Begrenzung der höchstmöglichen Brennstofftemperaturen, bis zu denen die Spaltproduktfreisetzung gering bleibt [RAG1983]. Für das deutsche Referenzbrennelement mit niedrig angereichertem Uran in Form von TRISO-Partikeln wurde eine weitgehende Rückhaltung der Spaltprodukte bis zu einer Temperatur von 1.600°C nachgewiesen [ALL1980]. Bei der Auslegung des HTR-Modul wurde darauf geachtet, dass die Wartung, Inspektion und Reparatur der Anlage möglichst einfach ist [RAG1983]. Bezüglich Anlagensicherheit verfügt die Anlage über eine Reihe passiver Sicherheitsmerkmale. Beispiele sind die passive Nachwärmeabfuhr im Primärsystem und die geringe Überschussreaktivität durch kontinuierliche Beschickung [RAG1983]. Aufgrund dieser Anforderungen ergeben sich eine Reihe von Limitierungen und Anforderungen bei der Core- und Brennelementauslegung. Damit die Brennstofftemperatur bei allen Betriebszuständen unterhalb des vorgegebenen Maximums bleibt, ist der Durchmesser des Cores beschränkt. Beim HTR-Modul sind die Steuer- und Abschaltelemente im Seitenreflektor untergebracht. Die Wirksamkeit dieser Elemente reicht nur bis zu einem bestimmten Durchmesser des Cores aus. Des Weiteren ist nur eine niedrige Leistungsdichte und begrenzte Einheitsleistung je Reaktoreinheit machbar. Es konnte gezeigt werden, dass eine Einheitsleistung je Reaktoreinheit bis zu 225 MW_{th} realisierbar ist, ohne dass die maximale Brennelementtemperatur bei einem druckentlasteten Reaktorkern (DES) und passiver Nachwärmeabfuhr (NWA) über die Flächenkühler die vorgegebene 1.600°C-Grenze nicht überschritten wird [JAH1983]. In dieser Studie wurden auch die Bandbreiten einiger Unsicherheiten bei den Eingangsdaten, z. B. Menge der anfallenden Nachzerfallswärme oder effektive Wärmeleitfähigkeit der Kugelschüttung, berücksichtigt. Bei einer Zweikreisanlage, bei der mit einem Wassereintrichstörfall gerechnet werden muss, wird das Moderationsverhältnis üblicherweise so gewählt, dass es im Normalbetrieb optimal ist. Bei einem Wassereintrich wird das Moderationsverhältnis im Core erhöht. Damit eine Leistungsexkursion in diesem Szenario unterbunden wird, ist die mögliche Schwermetallbeladung auf

7 g je Brennelement begrenzt [SIE1987]. Bei der gewählten Mehrfachdurchlaufstrategie (15 Durchläufe im Durchschnitt) wird eine recht homogene Verteilung von Abbrandzuständen im Core erreicht. Hierdurch ergeben sich homogene Temperaturverhältnisse bei einer homogenen räumlichen Leistungsentfaltung.

HTR-10

Der HTR-10 ist ein kleiner Kugelhaufenreaktor mit einer thermischen Leistung von 10 MW, der am Institute for Nuclear and New Energy Technology (*INET*) in der Nähe von Peking betrieben wird. Der Aufbau des HTR-10 ähnelt dem des HTR-Modul sehr stark (siehe Abbildung 1.9a). An der Anlage werden Experimente durchgeführt, die u. a. die Sicherheitsmerkmale der Technik des Kugelhaufenreaktors unter Beweis stellen sollen.

HTR-PM

Der HTR-PM befindet sich zurzeit in der Entwicklungsphase. Angedacht wird eine HTR-Modul ähnliche Anlage mit einer thermischen Leistung von 250 MW je Core (siehe Abbildung 1.9b). Auch diese Anlage soll als Doppelblock ausgeführt werden. Dessen Leistung wird durch eine Vergrößerung der Corehöhe im Vergleich zum HTR-Modul erreicht.

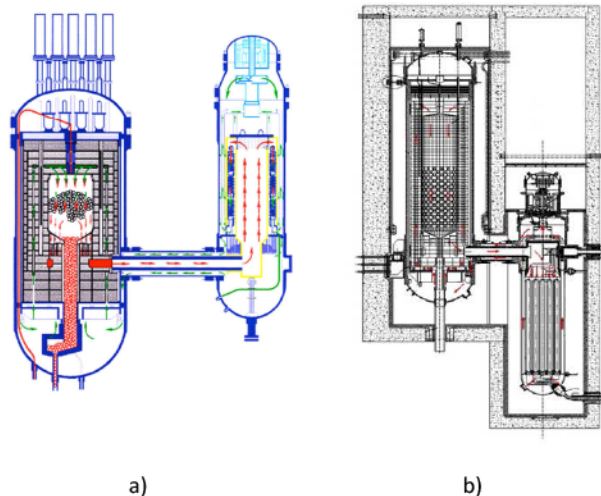


Abbildung 1.9: Schematische Darstellung
a) HTR-10 [ZHA2009]
b) HTR-PM, vertikaler Querschnitt [ZHE2009]

High Temperature Test Reactor (HTTR)

Der HTTR ist weltweit der einzige zurzeit im Betrieb befindliche HTR mit prismatischen Brennelementen (siehe Abbildung 1.10). Im Gegensatz zum Kugelhaufenreaktor werden die prismatischen Blöcke bei Blockreaktorkonzepten, ähnlich wie beim LWR, in regelmäßigen Zeitintervallen umgesetzt bzw. ausgetauscht. Dazu muss die Anlage heruntergefahren und der Reaktor-druckbehälter geöffnet werden. Die zentrale Bohrung in den Blockelementen dient zur Handhabung beim Brennelementwechsel.

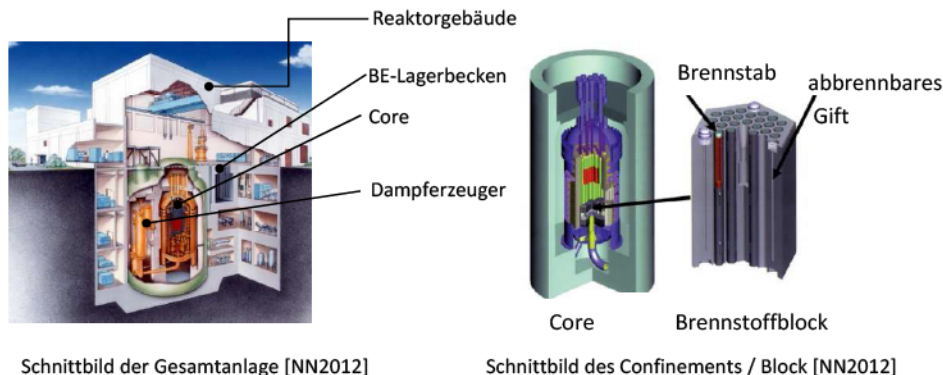


Abbildung 1.10: Schematische Darstellung des HTTR-Aufbaus

Ziel der Anlage ist es, die Technologie für fortschrittliche Hochtemperaturreaktoren zu demonstrieren und weiter voranzutreiben. Des Weiteren sollen Bestrahlungstests zur Unterstützung der Grundlagenforschung im Bereich Brennstoff, Materialien und Komponenten durchgeführt werden [NOJ1998]. Erstkritikalität wurde am 10. November 1998 erreicht [SHI2004]. Zurzeit wird die produzierte Wärme ungenutzt an die Umgebung abgeführt. In der Zukunft soll die Anlage im Rahmen eines Pilotprojekts mit einer Wasserstoffproduktionsanlage gekoppelt werden. Hiermit soll die Produktion von Wasserstoff mit Hilfe nuklearer Wärme demonstriert werden. Im Rahmen internationaler Projekte wurde die Anlage zur Validierung einzelner Programme herangezogen [IAEA2003].

Sonstige Konzepte

Über die beschriebenen HTR-Konzepte hinaus gab es auf der Seite der Kugelhaufen-HTR noch viele Konzeptstudien, wie z. B. der HTR-500 ($1.390 \text{ MW}_{\text{th}} / 550 \text{ MW}_e$), der HTR-100 ($250 \text{ MW}_{\text{th}} / 100 \text{ MW}_e$) und PBMR-268 ($268 \text{ MW}_{\text{th}} / 115 \text{ MW}_e$), die allerdings nie realisiert wurden. Die Anlagen haben keine Relevanz für aktuell zur Diskussion stehende HTR. HTR mit prismatischen Blöcken werden vornehmlich in den USA, Japan, England und Frankreich verfolgt. Dabei wurden bisher drei Anlagen realisiert, Dragon ($20 \text{ MW}_{\text{th}}$, -), Peach Bottom Unit 1 ($115,5 \text{ MW}_{\text{th}} / 40 \text{ MW}_e$) und Fort St. Vrain ($842 \text{ MW}_{\text{th}} / 330 \text{ MW}_e$). Alle diese Anlagen sind mittlerweile stillgelegt. Neue Konzepte, wie z. B. der ANTARES ($600 \text{ MW}_{\text{th}} / 250 \text{ MW}_e$) oder der GT-MHR ($593 \text{ MW}_{\text{th}} / 287 \text{ MW}_e$) wurden bisher nicht realisiert.

Auswahl der Referenzanlagen

Die Funktionalität der im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Werkzeuge soll an Hand von ausgewählten Referenzanlagen gezeigt werden. Aufgrund der Tatsache, dass geplante Kugelhaufen-HTR, wie z. B. der HTR-PM, sich am HTR-Modul orientieren und zu dieser Anlage umfangreiche Literatur vorliegt, wird der HTR-Modul als Referenzanlage für Kugelhaufen-HTR gewählt. Da der HTTR die einzige bestehende Anlage mit prismatischen Brennelementen ist, wird diese Anlage stellvertretend für prismatische Block-HTR betrachtet.

1.3 Freisetzungsrelevante Nuklide

Eine Reihe von Kriterien entscheiden darüber, welche Nuklide freisetzungsrelevant sind. Die Gesamtmenge im Core, das Transportverhalten, aber auch die radiologisch und biologische Wirkung sind wichtige Kriterien.

Die Freisetzung von Aktivierungsprodukten spielt im Normalbetrieb aufgrund des vergleichsweise geringen Aktivitätsinventars nur eine untergeordnete Rolle. Die Freisetzung der Schwermetalle und der nichtflüchtigen Metalle in die Atmosphäre ist wegen der extrem niedrigen Flüchtigkeit dieser Elemente nicht zu befürchten. Ausgenommen hiervon sind Antimon (Sb), Europium (Eu) und Samarium (Sm), die einen nennenswerten Beitrag liefern. Die restlichen Spaltprodukte lassen sich aufgrund ihres Freisetzungsverhalten in gasförmige Spaltprodukte, wie z. B. Iod (I), Krypton (Kr) und Xenon (Xe), und in metallische Spaltprodukte, wie z. B. Caesium (Cs), Strontium (Sr) und Silber (Ag), einteilen [KRO1982]. Für Abschirmungsrechnungen, Ausbreitungsrechnungen oder zur Ermittlung von Ortsdosisleistungen genügt es oft, nur einige wenige spezielle Radionuklide, die Leitnuklide, zu berücksichtigen. Die Leitnuklide verfügen über chemische Ähnlichkeit und/oder so hohe spezifische Zerfallsenergie, dass sie schwächer strahlende Radionuklide in ihrer Wirkung überdecken [BUN2013]. Im Rahmen dieser Arbeit werden die Leitnuklide I-131, Cs-137, Sr-90 und Ag-110m betrachtet. Die Vorgehensweise lässt sich auf prinzipiell jedes Nuklid anwenden. Primär geht es darum, eine integrale Vorgehensweise bei der räumlich aufgelösten Spaltproduktfreisetzung darzustellen.

Spaltedelgase

Bei den Spaltedelgasen sind vor allem Krypton und Xenon-Spezies aufgrund deren Inventars von Bedeutung. Sie sind von Bedeutung für die Ganzkörper Beta- und Gamma-Dosis [KRO1982]. Die Spaltedelgase werden durch intakte Partikelbeschichtungen sogar bei hohen Temperaturen komplett zurückgehalten. Das Freisetzungsverhalten der Spaltedelgase ist sehr ähnlich zu Iod, das im Rahmen dieser Arbeit stellvertretend für alle gasförmigen Spaltprodukte im Detail betrachtet wird.

Iod-131

Die Spaltausbeute von Iod-131 (I-131) liegt bei thermischen Reaktoren bei ungefähr 2,9 %. Von den Iod-Spezies ist lediglich I-129 stabil, die restlichen Isotope sind radioaktiv. So ist I-131 ein Beta-Strahler. Iod ist ein wichtiger Bestandteil des tierischen und menschlichen Organismus und wird mit der Nahrung aufgenommen. Die Konzentration ist in der Schilddrüse, die im menschlichen Körper eine Reihe wichtiger Funktionen wahrnimmt, am höchsten. Iod besitzt aufgrund seiner physikalisch-chemischen Eigenschaften eine hohe Mobilität. Bedingt durch die Halbwertszeit von etwa 8 Tagen ist die Aktivität am Anfang eines Störfalls hoch und bestimmt somit die Strahlenbelastung in den ersten Tagen. Aus all diesen Gründe ist I-131 freisetzungsrelevant.

Caesium-137

Kriterien für Caesium-137 (Cs-137) sind die hohe Spaltausbeute (~ 6 %), die lange Halbwertszeit (30 Jahre) und die hochenergetische Gammastrahlung [SCH1974]. Caesium verhält sich im Körper ähnlich wie Kalium und lagert sich in den Zellen an. Insbesondere in Muskel- und Nervenzellen kann es so zu Schäden kommen.

Strontium-90

Strontium-90 (Sr-90) ist ein Beta-Strahler mit einer hohen Spaltausbeute ($\sim 6\%$), den der menschliche Körper aufgrund der hohen Ähnlichkeit zu Kalzium besonders gut aufnimmt. Strontium wird insbesondere in den Knochen eingelagert. Die Verweildauer im Körper kann somit Jahre bis Jahrzehnte betragen. Nuklide werden durch verschiedene nukleare Prozesse gebildet. Anhang 1 illustriert einen Ausschnitt des kompletten Nuklid-Graphen aus der ENDBF-VII.0 für I-131, Cs-137 und Sr-90. Diese Kette endet jeweils bei dem Nuklid von Interesse. Die Abbildung zeigt, dass die Nuklide I-131, Cs-137 und Sr-90 vornehmlich als indirektes Spaltprodukt, durch β^- -Zerfall aus Vorläufernukliden, entstehen.

Silber-110m

Silber-110m (Ag-110m) kann sich durch isomerische Transition in das Nuklid Ag-110 umwandeln, ist aber auch ein Beta-Strahler. Bei der isomerischen Transition wird Energie in Form eines Gammaquants freigesetzt.

In den vergangenen Jahren wurde erneut versucht, einen HTR als Einkreisanlage mit Heliumturbine zu konzipieren. So wurde für den PBMR-268 (*Pebble Bed Modular Reactor*) ein Brayton-Cycle angestrebt [MAT2004]. Der Brayton-Cycle, auch Joule-Kreisprozess genannt, ist ein rechtslaufender thermodynamischer Kreisprozess. Er ist ein Vergleichsprozess für den in Gasturbinen und Strahltriebwerken ablaufenden Vorgang und setzt sich aus zwei isentropen und zwei isobaren Zustandsänderungen zusammen. Vorteile eines solchen Konzeptes sind u. a. die Vermeidung eines möglichen Wassereintritts und eine weitere Anhebung des Wirkungsgrades. Eine Einkreisanlage stellt allerdings höhere Anforderungen an die Spaltproduktrückhaltung, um Wartungsarbeiten, z. B. am Turbosatz, zu ermöglichen. Die Primärkreislaufkomponenten sollten inspizierbar und reparierbar sein, so dass ein Stilllegungsrisiko hinreichend ausgeschlossen werden kann [MAT1991]. Laut [FOU2005] trägt Ag-110m zu knapp 50% zur Dosisbelastung bei Wartungsarbeiten der in dieser Studie untersuchten Einkreisanlage (bei einer Stahlabschirmung von 10 mm) bei. Die restliche Strahlenbelastung kommt vorwiegend von Cs-134 und Cs-137. Studien zeigen, dass das Einhalten der zulässigen Freisetzungsraten für einige Nuklide, wie z. B. das Ag-110m, bei einer Einkreisanlage im Vergleich zu Zweikreisanlagen aufwendiger ist [MUT2000]. Gerade die zur Diskussion stehende Rückhaltefähigkeit von Silber-Isotopen durch HTR-Brennelemente und die vergleichsweise lange Halbwertszeit von Ag-110m (249,8 Tage) stellen besondere Herausforderungen bei der Wartung und Instandsetzung von Einkreisanlagen dar. Eine Analyse der am Aufbau von Ag-110m beteiligten Reaktionen hat gezeigt, dass der wichtigste Entstehungsprozess



in der Datenbibliothek ENDF/B-VII.0 nicht vorhanden ist. Die Trennung zwischen Ag-110 und Ag-110m, wie sie in der ORIGEN-2.0 Datenbibliothek vorhanden ist, ist in dieser nuklearen Datenbibliothek nicht gegeben, da es für Aktivierungsprodukte heutzutage eine dezidierte Datenbibliothek gibt [OEC2012a]. Demnach ist eine Erweiterung der Datenbibliothek notwendig, um eine korrekte Erfassung dieses Nuklids zu ermöglichen. Details zu dieser manuellen Erweiterung der ENDF/B-VII.0 sind in Anhang 2 näher beschrieben.

1.4 Existierende Programme zur Spaltproduktfreisetzung kugelförmiger Brennelemente

Die beschriebenen physikalischen Vorgänge, die in den letzten Abschnitten zusammengefasst wurden, wurden u. a. am Forschungszentrum Jülich in mathematische Modelle gefasst. Zunächst wurde eine Inventarisierung der vorhandenen Software durchgeführt. An dieser Stelle sollen nur die Hauptmechanismen erläutert werden, die durch die einzelnen Programme beschrieben werden. Alle Programme haben gemein, dass sie nicht jedes einzelne thermodynamische Detail auf mikroskopischer Ebene beschreiben, so wie es in [DAN1992] versucht wird. Das Hauptaugenmerk liegt in den hier vorgestellten Programmen darauf, dass die Gesamtrechnung zu plausiblen Ergebnissen führt [KRA1991].

1.4.1 FRESCO-I

Mit FRESCO-I (*Freisetzung aus dem Core*) [KRO1982, VER1991] kann die Freisetzung von Spaltprodukten eines HTR unter Störfallbedingungen simuliert werden. Das Rechenmodell wurde zu einer Zeit entwickelt, in der HTR mit hoher Einheitsleistung, wie z. B. der THTR, diskutiert wurden. Die Software konzentriert sich demnach auf Phänomene, die bei einem Kugelhaufen-HTR hoher Einheitsleistung mit hohen Brennstofftemperaturen (siehe Abbildung 1.11) unter Störfallbedingungen relevant sind.

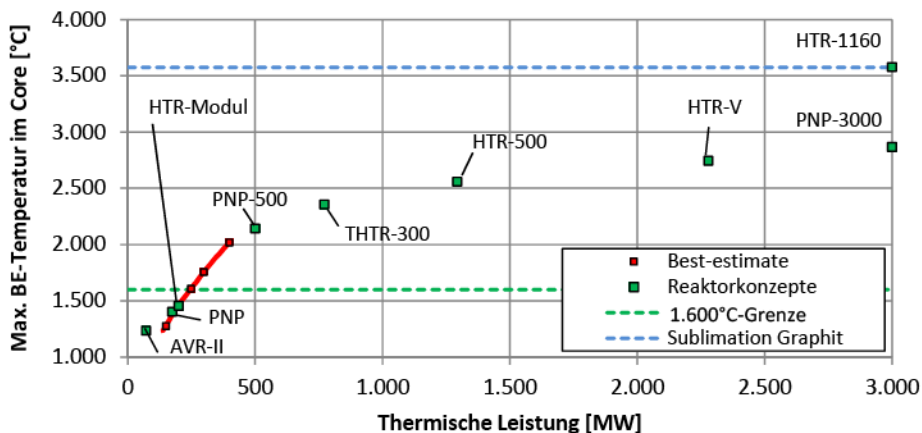


Abbildung 1.11: Maximale Brennstofftemperaturen im Druckentlastungsstörfall in Abhängigkeit von der thermischen Einheitsleistung des Reaktors (Best Estimate-Rechnungen für modulare HTR-Konzepte mit $D_{\text{Core}} = 3 \text{ m}$, $H_{\text{Core}} = 9,42 \text{ m}$, bzw. HTR-Modul-Geometrie) [JAH1991, REH1984] (eigene Darstellung)

Aufgrund der hohen Störfalltemperaturen wurde mit recht hohen Partikelbruchanteilen gerechnet. Bestimmte Phänomene während des Normalbetriebs, wie z. B. die Spaltproduktfreisetzung aufgrund von Recoil, fallen bei solchen Reaktorkonzepten deutlich weniger ins Gewicht als bei modularen Reaktorkonzepten, die erst später entwickelt wurden. Daher wurden solche Phänomene durch die Rechenmodelle zunächst nicht modelliert. Die Rechnung beschränkt sich auf die Spaltproduktfreisetzung unter Störfallbedingungen.

Als Startpunkt für die Simulation wird für jede Rechenmasche die Historie eines für diese Masche repräsentativen Brennelements vereinfacht nachvollzogen [KRO1982]. Aus einer vorgegebenen Leistungsverteilung wird eine Inventarverteilung am Anfang des Störfalls berechnet. Dabei erhöht sich das Inventar in jeder durchlaufenen Masche. Für die n -te Masche von oben folgt demnach für das Inventar des für diese Masche repräsentativen Brennelements:

$$\text{Inv}_{\text{SP}} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{p_{\text{th},\text{Masche},i} \cdot V_{\text{Masche},i}}{n_{\text{BE},\text{Masche}} \cdot 200 \text{ MeV/Spaltung}} \cdot \gamma_{\text{SP}} \right) \quad 1.2$$

mit:	$p_{\text{th},\text{Masche},i}$	- mittlere Leistungsdichte in der Masche „i“	[W/m ³]
	$V_{\text{Masche},i}$	- Maschenvolumen der Masche „i“	[m ³]
	$n_{\text{BE},\text{Masche}}$	- Anzahl Brennelemente in der Masche	
	γ_{SP}	- Ausbeute des betrachteten Nuklids	[Atome/Spaltung]

Da mit einem konstanten Verhältnis von der Spaltproduktinventarzunahme zur Maschenleistungsdichte gerechnet wird, ist dies nur eine grobe Näherung. Des Weiteren wird die Leistungshistorie nur für einen Durchlauf nachvollzogen. Demnach kann das Modell streng genommen nur für die Simulation von Hochtemperaturreaktoren mit OTTO-Beschickungsweise (*Once Through Then Out*) genutzt werden. Bei dieser Beschickungsweise durchlaufen die Brennelemente das Core einmalig und werden dem Core danach nicht erneut zugeführt, so wie es bei einer MEDUL-Beschickungsweise (*Mehrfach Durchlauf*) der Fall ist. Beim OTTO-Verfahren ist eine gewisse Verteilung des erreichten Endabbrandes aufgrund der unterschiedlichen Laufbahnen gegeben. Bei dieser Beschickungsweise haben benachbarte Brennelemente in erster Näherung den gleichen Abbrandzustand. Durch den höheren Anteil an frischen Brennelementen und damit höheren Spaltstoffdichten ist einerseits die absolute Leistung im oberen Corebereich höher und andererseits ist das Verhältnis der Maximalleistung zur nominellen Leistung größer. Die Spaltproduktverteilung zu Störfallbeginn soll der Inventarverteilung des Gleichgewichtscores entsprechen.

Als grobe Näherung wurden die Rechenmodelle allerdings in der Vergangenheit auch für HTR mit Mehrfachdurchlauf genutzt, z. B. [SIE1988a]. Die vielfältigen Historien der unterschiedlichen Brennelemente, so wie sie bei Mehrfahrdurchlauf vorkommen, können mit dieser Vereinfachung aber nicht berücksichtigt werden.

Alleinstellungsmerkmal von FRESCO-I ist die Simulation des Spaltprodukttransports im Kühlgas und die Ablagerung von Spaltprodukten auf Reflektoroberflächen. Je Reflektormasche wird eine repräsentative Reflektorbohrung betrachtet. Speicherplatzbedingt wurde früher nur ein innerer Teil der Reflektorbohrung in der Diffusionsrechnung höher aufgelöst. Diese Vereinfachung ist in diesem Fall erlaubt, da aufgrund der recht moderaten Reflektortemperaturen und der begrenzten Dauer des Betrachtungszeitraumes nur mit einer begrenzten Durchdringungstiefe zu rechnen ist. Bei längeren Betrachtungszeiträumen wird allerdings eine größere Tiefe erreicht, die eine höhere Auflösung erforderlich macht.

1.4.2 FRESCO-II

Aufgrund der Tatsache, dass FRESCO-I sich nur auf die Simulation von Kernaufheizzstörfällen konzentriert, wurde das Nachfolgeprogramm FRESCO-II mit der Zielsetzung entwickelt, das Freisetungsverhalten sowohl unter Normal- als auch unter Störfallbedingungen zu simulieren

Diese Spaltprodukte können bei genügender Restenergie in umgebende Festkörper eindringen. So wird die integrale Freisetzungsrates verringert. Dieser Effekt bleibt in FRESCO-II unberücksichtigt, da jeweils nur ein Kugelbrennelement betrachtet wird.

Die Behandlung des Spaltprodukttransports in einem HTR-Brennelement mit einer Transportgleichung lässt es nicht zu, mögliche, verschiedenartige Diffusionsvorgänge im Brennelement zu unterscheiden und getrennt zu erfassen. Diese werden stattdessen in einer über das gesamte Brennelement ausgedehnten, „repräsentativen“ Diffusion zusammengefasst. Eine solche, von den mikroskopischen Gegebenheiten mehr oder weniger losgelöste Beschreibung des Spaltprodukttransports wird als „effektive Diffusion“ bezeichnet [MUE1976]. Die Diffusionskoeffizienten sind eine Funktion der Temperatur und berechnen sich üblicherweise nach einem Arrhenius-Ansatz (siehe Gleichung 1.5). Dabei enthält die Funktion einen oder zwei Temperaturbereiche, falls es verschiedene Diffusionsregime (mit unterschiedlicher Aktivierungsenergie) gibt. Aufgrund der Addition ist der Einfluss des jeweils anderen Terms vernachlässigbar klein und lediglich im Übergangsbereich merkbar.

$$D(T) = \sum_{i=1}^n D_{0,i} (c_{SP}, \Gamma) \cdot e^{\frac{-E_{A,i}}{R_G \cdot T}} \quad [m^2/s] \quad 1.5$$

mit:	$D_{0,i}$	- Frequenzfaktor	$[m^2/s]$
	c_{SP}	- Spaltproduktkonzentration	$[mol/m^3]$
	Γ	- schnelle Neutronenfluss (E > 0,1 MeV)	$[n/m^2]$
	E_A	- Aktivierungsenergie	$[J/mol]$
	R_G	- universelle Gaskonstante	$[J/(mol \cdot K)]$
	T	- Temperatur	$[K]$
	n	- Anzahl Temperaturbereiche (n = 1,2)	

Um die reale Brennstoffkugel deterministisch abzubilden, werden eine Reihe von Vereinfachungen getroffen. Das Brennelement wird als ein Gefüge von Graphitkörnern und Partikeln betrachtet. Die Partikel sind nicht wie in der Realität regellos über das Volumen der Brennstoffzone verteilt. Es wird vereinfachend angenommen, dass die Packungsdichte der Partikel über die Brennstoffzone konstant ist. Die Schichtdickenverteilungen bleiben unberücksichtigt. Partikel sind entweder intakt oder deren Beschichtung hat vollständig versagt. Hierbei wird ein defektes Partikel als ein Partikelkern ohne Beschichtung behandelt. Davon abweichende Versagensmechanismen, bei denen die Beschichtung teilweise noch intakt ist, werden nicht modelliert. Zum Zeitpunkt des Versagens werden die in der Beschichtung befindlichen Spaltprodukte ohne Verzögerung in die Graphitmatrix freigesetzt. Nach dem Versagen werden die Partikel wie unbeschichtete Partikel, d. h. wie reine Partikelkerne, behandelt. Eine Charge defekter Partikel besteht aus Partikeln, die zum gleichen Zeitpunkt defekt wurden. Bei einer Vorhersagerechnung werden für die Anzahl Defektpartikel keine natürlichen Zahlen angenommen, da es nicht möglich ist, den Zeitpunkt des Partikelversagens vorherzusagen. Mit Hilfe der in Messungen ermittelten Defektanteile ist es lediglich möglich, mittlere Verhältnisse abzubilden. Bei Nachrechnungen von Ausheizexperimenten, bei denen aufgrund von Krypton-Freisetzungsraten auf das Versagen einzelner Partikel geschlossen werden kann, werden natürliche Zahlen bei der Anzahl der Defektpartikel angesetzt.

Der Matrixgraphit wird durch ein Gefüge aus Graphitkörnern mit einheitlichem Radius repräsentiert. Des Weiteren wird die Graphitmatrix in der Diffusionsrechnung als homogenes Medium, das in

Verbindung mit der Brennelementoberfläche steht, angenommen. Poren, Blasen und Fehlstellen bzw. Defekte im Material werden nicht näher betrachtet und werden durch einen effektiven Diffusionskoeffizienten, der einen schnellen Transport garantiert, abgedeckt.

Die Freisetzungsrechnung in FRESKO-II ist zweigeteilt. Spaltprodukte, die im Innern der in Abbildung 1.13 dargestellten Körper entstehen, müssen zuerst aus den Körpern austreten, um anschließend über die Korngrenzen der Graphitmatrix wandern zu können. Das radiale Temperaturprofil im Brennelement wird vernachlässigt, und es wird in konservativer Weise davon ausgegangen, dass die Zentraltemperatur über den gesamten Radius vorliegt. Somit genügt es, lediglich ein intaktes Partikel, Graphitkorn usw. zu simulieren. Im Programm werden zu jedem Zeitschritt zuerst das Freisetzungsverhalten eines repräsentativen Graphitkorns, eines intakten beschichteten Partikels und verschiedener Partikelchargen mit defekter Beschichtung simuliert (siehe Abbildung 1.13).

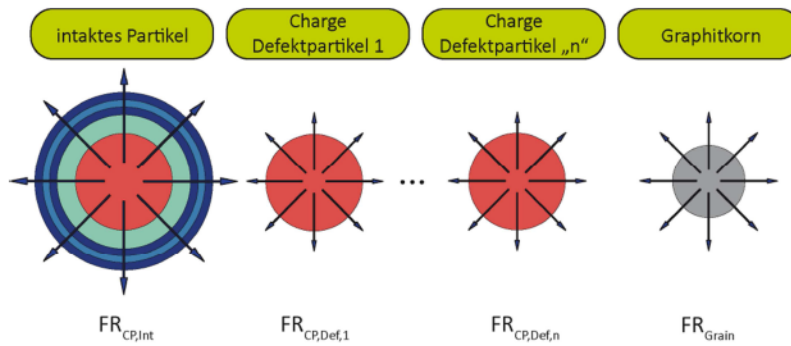


Abbildung 1.13: In FRESKO-II berücksichtigten Teilchen (eigene Darstellung)

Das radiale Spaltproduktkonzentrationsprofil im Innern dieser durch eine rotationssymmetrische Kugel modellierten Diffusionskörper wird durch das Lösen folgender Diffusionsgleichung berechnet:

$$\frac{\partial c_{SP}}{\partial t} = D(r,t) \cdot \left[\frac{\partial^2 c_{SP}}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial c_{SP}}{\partial r} \right] + \dot{Q} - \lambda \cdot c_{SP} \quad [\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})] \quad 1.6$$

mit:

λ	- Zerfallskonstante	[1/s]
D	- Diffusionskonstante	[m ² /s]
\dot{Q}	- Quellterm, mit der die Spaltprodukte entstehen	[mol/s]

Dabei ist die mittlere Spaltproduktkonzentration im Matrixgraphit die äußere Randbedingung für jede Freisetzungsrechnung. Die Freisetzungsrates „FR“ eines jeden Diffusionskörpers kann mit Hilfe des vorher berechneten Konzentrationsprofils nach folgender Gleichung berechnet werden:

$$FR = (c_{SP}(r=R) - c_{SP,\infty}) \cdot \alpha \cdot \beta \cdot A \quad [\text{mol/s}] \quad 1.7$$

mit:

A	- Kugeloberfläche	
$c_{SP}(r=R)$	- Spaltproduktkonzentration an der Kugeloberfläche	[mol/m ³]
$c_{SP,\infty}$	- Spaltproduktkonzentration außerhalb der Grenzschicht	[mol/m ³]
α	- Haftkoeffizient	
β	- Stoffübergangszahl (zwischen Grenzschicht und Umgebung)	[m ² /s]

Die aus den verschiedenen im ersten Rechenschritt betrachteten Diffusionskörpern resultierende Gesamtfreisetzungsrates geht in den Quellterm für die darauffolgende Freisetzungsrechnung in der Graphitmatrix ein. Die Graphitmatrix ist ein weiterer Diffusionskörper. In diesem Rechenschritt wird der Spaltprodukttransport über die Poren abgebildet. Weiterer Bestandteil dieses Quellterms ist die Bildungsrate von Spaltprodukten, die bedingt durch die Uranverunreinigung und die Freisetzung des Spaltproduktinventars der Beschichtung beim Partikelversagen, direkt auf den Korngrenzen entstehen. Der Quellterm in der Brennstoffzone $\dot{Q}_{CP,Zone}$ berechnet sich nach folgender Gleichung:

$$\dot{Q}_{CP,Zone} = n_{CP,Int} \cdot FR_{CP,Int} + \sum_i^n n_{CP,Def,i} \cdot FR_{CP,Def,i} + n_{Grain} \cdot FR_{Grain} + \frac{FR_{Puffer}}{\Delta t} + \dot{Q}_{Korng} \quad 1.8$$

mit:	$\dot{Q}_{CP,Zone}$	- Quellterm in der Brennstoffzone	[mol/s]
	$n_{CP,Int}$	- Anzahl Defektpartikel	
	$FR_{CP,Int}$	- Freisetzungsrates eines intakten Partikels	[mol/s]
	$n_{CP,Def,i}$	- Anzahl Defektpartikel in der Defektpartikelcharge „i“	
	$FR_{CP,Def,i}$	- Freisetzungsrates eines Partikels der Defektpartikelcharge „i“	[mol/s]
	n_{Grain}	- Anzahl repräsentativer Graphitkörner	
	FR_{Grain}	- Freisetzungsrates eines repräsentativen Graphitkorns	[mol/s]
	FR_{Puffer}	- freigesetztes Beschichtungsinventar beim Partikelversagen	[mol]
	n	- Anzahl Chargen Defektpartikel	
	Δt	- Zeitschrittweite	[s]
	\dot{Q}_{Korng}	- Kontaminationsbedingter Quellterm auf den Korngrenzen	[mol/s]

Im Gegensatz zu dem Spaltproduktfreisetzungsprogramm *KUGEL* [KRA1991] werden die separat gelösten Differentialgleichungssysteme nach der getrennten Lösung nicht ausiteriert. Damit gehen die beiden Konzentrationsprofile nicht zu jedem Zeitschritt exakt ineinander über. Die Abweichung zwischen den beiden Konzentrationsprofilen ist allerdings sehr gering. Falls die Zeitschritte nicht zu groß gewählt werden, bleibt der Einfluss von untergeordneter Bedeutung.

Als Randbedingung wird am Übergang vom Brennelement zum Kühlgas eine Vakuumrandbedingung angesetzt, das heißt, dass vereinfachend angenommen wird, dass die Konzentration im Kühlgas stets gleich Null ist. Dies führt dazu, dass die so berechnete Freisetzungsrates oberhalb der Freisetzungsrates liegt, bei der eine Spaltproduktkonzentration im Kühlgas berücksichtigt wird.

In FRESKO-II wird vereinfachend angenommen, dass die schnelle Neutronenfluenz und der Abbrand eine lineare Funktion der Gesamtzeit des Kugelbrennelements im Reaktorcore ist. Die schnelle Neutronenfluenz spielt nur eine untergeordnete Rolle bei der Spaltproduktfreisetzungsrechnung. Nur für die Diffusionskoeffizienten einiger Spaltprodukte, wie z. B. Cs-137, konnte in der Vergangenheit ein geringer Einfluss der schnellen Neutronenfluenz aufgrund der Datenlage vermutet werden. Dies wird bei den Diffusionskoeffizienten berücksichtigt [IAE1997].

Eine Reihe anderer Spaltproduktfreisetzungsprogramme, so wie z. B. die Software *GETTER* (Hochtemperatur Reaktorbau, *HRB*) oder der Code *SORS* (General Atomics, *GA*), verfügen über programminterne Abbrandalgorithmen, die parallel zur Freisetzungsrechnung das aktuelle Inventar einiger Spaltprodukte berechnen [KES2007, SCH1974]. Allerdings sind die berücksichtigten Reaktionsketten auf die wichtigsten Vorläuferruklide beschränkt, so dass bestimmte Prozesse, die zum Auf- und Abbau beitragen, vernachlässigt werden. Ein weiterer Nachteil solcher Abbrand-

algorithmen ist, dass neuere Nuklidbibliotheken nur mit erheblichem Aufwand berücksichtigt werden können. In FRESCO-II wird der Aufbau des Spaltproduktinventars während des Normalbetriebs programmintern durch eine einfache Gleichung bestimmt. Auf diese Tatsache und deren Folgen wird im Abschnitt 2.5.3 im Detail eingegangen.

1.4.3 PANAMA

Das Programm PANAMA berechnet die Wahrscheinlichkeit des Versagens von TRISO-Partikeln unter Störfallbedingungen [PRO1983]. Das Programm wurde in den 80-er Jahren entwickelt und basiert auf dem Druckkesselmodell [VER1985].

In dem Modell wird davon ausgegangen, dass die Siliziumkarbidschicht die einzige Schicht ist, die dem inneren Druck standhält. Dieser innere Druck entsteht durch gasförmige Spaltprodukte, die im Reaktorbetrieb gebildet werden, sowie Kohlenmonoxid aus der Reaktion des bei der Spaltung freigesetzten Sauerstoffs mit dem umgebenden Kohlenstoff. In die Berechnung der Menge an gasförmigen Spaltprodukten findet die mittlere Ausbeute der gasförmigen Spaltprodukte und die Spaltrate Eingang. Bei den Spaltgasen werden nur die stabilen Spaltgase Krypton und Xenon betrachtet, da diese insgesamt den größten Anteil bilden. Die Sauerstoffbildung in UO_2 -Kernen ist stark von der Bestrahlungsvorgeschichte abhängig. Der Druck lässt sich aus der idealen Gasgleichung ermitteln [VER1985]:

$$p = \frac{n \cdot R_G \cdot T}{V_{\text{Puffer}}} \quad \text{mit} \quad n = (f_{\text{SG}} \cdot Y_{\text{SG}} + \text{OPF}) \cdot A \cdot \frac{V_{\text{CP-Kern}}}{V_m} \quad 1.9$$

mit:	n	- Stoffmenge	[mol]
	R_G	- universelle Gaskonstante	[J/(mol·K)]
	T	- Temperatur	[K]
	V_{Puffer}	- Leervolumen in der Pufferschicht (= 50 des Volumens)	[m ³]
	f_{SG}	- Spaltgasfreisetzungsanteil	
	Y_{SG}	- Spaltproduktausbeute der stabilen Spaltgase (= 0,31)	
	OPF	- Sauerstoffatome pro Spaltung	
	A	- Schwermetallabbbrand	[FIMA]
	$V_{\text{CP-Kern}}$	- Volumen des Partikelkerns	[m ³]
	V_m	- molares Volumen im Partikelkern	[m ³ /mol]

FIMA (fissions per initial metal atom) ist eine gängige Einheit des Abbrandes in der Reaktortechnik. Der Abbrand, ausgedrückt in FIMA, berechnet sich nach folgender Gleichung:

$$\text{FIMA} = \frac{A \cdot \frac{1 \cdot 10^6 \cdot 24 \cdot \frac{h}{d} \cdot 3600 \cdot \frac{s}{h}}{1 \cdot 10^6 \cdot g_{\text{SM}} / t_{\text{SM}}} \cdot M_{\text{Partikel}}}{E_f \cdot N_A} \cdot 100 \quad [\quad] \quad 1.10$$

mit:	A	- Abbrand	[MWd/t _{SM}]
	M_{Partikel}	- mittlere molare Masse des CP-Kerns	[g/mol]
	E_f	- mittlere Spaltenergie je gespaltenes Atom	[J/Atom]
	N_A	- Avogadro-Konstante	[Atome/mol]

Für die Berechnung der Kohlenmonoxidmenge kommen empirische Gesetze zum Einsatz. Die Anzahl der Sauerstoffatome pro Spaltung (*OPF*) berechnet sich im Normalbetrieb nach folgender Gleichung [PRO1985]:

$$\log(OPF) = -10,08 - \frac{0,85 \cdot 10^4}{T_{Mittl}} + 2,0 \cdot \log(t_B) \quad 1.11$$

mit:	t_B	- Bestrahlungszeit	[s]
	T_B	- mittlere Bestrahlungstemperatur	[K]

Der Druck innerhalb des Partikels wird in PANAMA nach der idealen Gasgleichung berechnet. Das für die Spaltgase zur Verfügung stehende Volumen wird durch das freie Volumen in der Pufferschicht, üblicherweise etwa 50 % des geometrischen Volumens, gebildet. In den Partikeln werden je nach erzielttem Abbrand Drücke von etwa 7 MPa erreicht.

In konservativer Weise wird die stützende Wirkung der inneren und äußeren Pyrokohlenstoffschicht auf die SiC-Schicht in dem Modell nicht berücksichtigt [VER1985]. Die aus dem Innendruck resultierende Nennspannung in der Querschnittsfläche der Kugel wird der zulässigen Zugspannung des Siliziumkarbids gegenübergestellt. Es wird angenommen, dass das Partikel beim Überschreiten der zulässigen Zugspannung birst. Dabei werden die gasförmigen Spaltprodukte sofort freigesetzt. Herstellungsbedingt ist die zulässige Zugspannung gemäß einer Weibullverteilung verteilt. Aufgrund dieser Verteilung ergibt sich eine Versagenswahrscheinlichkeit der Partikel.

Die Größenänderung des Partikelkerns mit dem Abbrand, auch „Fuel Swelling“ genannt, wird im Modell nicht betrachtet. Als Anfangsdurchmesser des Brennstoffpartikels bzw. Schichtdicke des Puffers der Siliziumkarbidschicht wird jeweils der Nenndurchmesser bzw. die Nennschichtdicke, so wie sie in den Brennstoffspezifikationen definiert ist, angesetzt. Eine produktionsbedingte Verteilung dieser Größen wird in PANAMA nicht berücksichtigt. Neuere Überlegungen deuten allerdings darauf hin, dass vornehmlich die Schichtdickenverteilung der Siliziumkarbidschicht einen maßgeblichen Einfluss auf die durchschnittliche Berstwahrscheinlichkeit hat.

Die Dicke der SiC-Schicht nimmt aufgrund von Korrosionserscheinungen allmählich ab. Im Modell wird angenommen, dass die Schichtdickenabnahme uniform über die innere Begrenzungsfläche dieser Schicht stattfindet. Allerdings ist dies keine zwingend konservative Annahme, da lokale Verdünnungen bei japanischen Experimenten festgestellt wurden [VER1993]. Diese können zu lokalen Spannungsspitzen und damit zu früherem Partikelversagen führen.

Andere Modelle, wie z. B. *PARFUME* [MIL2004], simulieren die komplexe Interaktion der einzelnen Schichten und deren mehrachsige Spannungszustände. Dies ist allerdings vornehmlich bei Detailstudien der Partikel von Interesse. Für eine rudimentäre konservative Abschätzung der Defektraten ist PANAMA gut geeignet [VER2012]. Die gewonnenen Erfahrungen mit dem PANAMA-Modell zeigen, dass die Messergebnisse deutscher Ausheizexperimente gut getroffen werden. Sowohl die zeitliche Entwicklung der unverzögerten Krypton-Freisetzung durch ein komplettes Versagen der Beschichtung, als auch ein stetiger Anstieg des diffusiven Transports durch die noch intakte äußere PyC-Schicht werden in der FRESCO-II-Rechnung gut getroffen [VER1990]. Bei hohen Temperaturen und Neutronenflüssen werden die Bruchanteile allerdings hin und wieder durch das PANAMA-Modell um einige Größenordnungen überschätzt [VER1993].

1.4.4 SPATRA

Der Code SPATRA modelliert die Ablagerung von Nukliden auf metallische Oberflächen. Die in SPATRA implementierten Modelle stimmen weitgehend mit der Physik in *PLATO* überein [EHR1981]. Die zur Verfügung stehende Literatur zu SPATRA ist dürftig. Die vorhandene Literatur beschränkt sich auf Anwendungsbeispiele und eine kompakte Eingabebeschreibung. Demnach wurden im Rahmen dieser Arbeit die implementierten Modelle zum großen Teil durch Reverse Engineering aus dem Quellcode herausgearbeitet.

Eingabedaten für eine SPATRA-Rechnung sind:

- Geometrie und Materialien der Komponenten im Primärkreis bzw. in der Ablagerungsstrecke
- Eingangs- und Ausgangstemperatur der Strecke in Abhängigkeit von der Zeit
- Eingangsdruck am Kühlgaseintritt und relative Druckverluste über die verschiedenen Komponenten
- Massenstrom am Eintritt und Konzentrationen der jeweiligen Nuklide

In SPATRA wird davon ausgegangen, dass die Teilchen, die an die Oberfläche gelangen, teilweise adsorbiert werden und zum Teil die Oberfläche penetrieren. Die Teilchen, die die Oberfläche penetrieren, sind dauerhaft gebunden und lösen sich nicht mehr von der Oberfläche. Die Menge Q_{ad} , die an der Oberfläche adsorbiert wird, berechnet sich nach folgender Gleichung:

$$Q_{ad} = A \cdot \alpha \cdot \beta \cdot v_{\perp} \cdot c_{sp} \quad [\text{mol/s}] \quad 1.12$$

mit:	A	- Oberfläche (geometrisch)	$[\text{m}^2]$
	β	- Adsorptionskoeffizient	
	v_{\perp}	- Auftreffgeschwindigkeit der Teilchen auf die Wand	$[\text{m/s}]$
	c_{sp}	- Konzentration des Spaltprodukts	$[\text{mol/m}^3]$

Der Stoffstrom, der die Oberfläche penetriert, berechnet sich nach:

$$Q_{ad} = A \cdot \alpha \cdot (1 - \beta) \cdot v_{\perp} \cdot c_{sp} \quad 1.13$$

mit: $1 - \beta$ - Penetrationskoeffizient

Die Auftreffgeschwindigkeit der Teilchen leitet sich aus der kinetischen Gastheorie her:

$$v_{\perp} = \sqrt{\frac{R_G \cdot T_{\text{Gas}}}{2\pi \cdot M}} \quad 1.14$$

mit:	R_G	- universelle Gaskonstante	$[\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})]$
	T_{Gas}	- Gastemperatur	$[\text{K}]$
	M	- Molmasse des Nuklids	$[\text{g/mol}]$

Für die fluiddynamische Eingabe ist SPATRA auf z. B. THERMIX / VSOP-Rechnungen [RUE2012] angewiesen. Senke und Quelle für das Kühlmedium im Systemcode VSOP werden üblicherweise nah am Reaktorcore angesetzt. Koaxialleitung und Dampferzeuger, wie sie beim HTR-Modul vorliegen, werden in VSOP nicht modelliert. Die Fluiddynamik im restlichen Teil des Primärkreises wird von SPATRA rudimentär aus den gegebenen Randbedingungen simuliert.

1.5 Anwendung existierender Programme auf Compacts

Die prismatischen Brennelemente bei Blockreaktoren enthalten wie die kugelförmigen Brennelemente auch beschichtete Brennstoffpartikel. Je nach Auslegung weichen die Abmessungen und die Zusammensetzung des Partikelkerns ab, aber alle modernen Brennstoffkonzepte sehen eine TRISO-Beschichtung für die Partikel vor (siehe Abbildung 1.14). Die Spaltproduktfreisetzung aus den Partikeln kann somit bei allen derzeitigen HTR-Konzepten prinzipiell mit den gleichen Simulationswerkzeugen beschrieben werden.

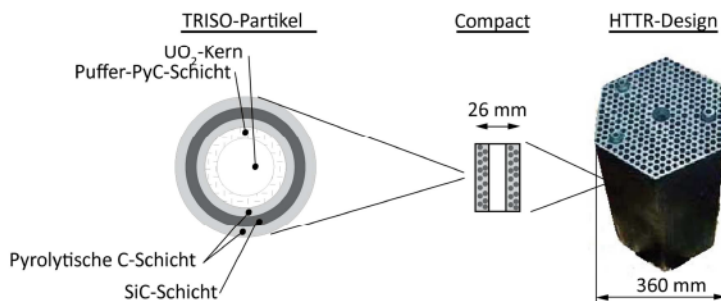


Abbildung 1.14: Brennstoffkonzept des HTTR (eigene Darstellung)

Bei Blockreaktoren werden die Partikel in zylinderförmige „Compacts“ verfüllt, die keine separate brennstofffreie Graphitzone enthalten. Bei der Herstellung von Compacts wird die Dicke des aus Matrixgraphit bestehenden „Overcoatings“ so dimensioniert, dass nach dem Pressvorgang zum Compact die gewünschte Brennstoffdichte (Füllfaktor) erreicht wird.

Beim japanischen HTTR ist das Compact im Hohlzylinder (siehe Abbildung 1.14). 14 Compacts werden in einem Graphitrohr zu einem Brennstab zusammengefasst, wobei der Brennstab direkt vom Kühlgas umströmt wird. Unter Betriebsbedingungen befindet sich innerhalb des Graphitrohrs stagnierendes Helium. Die Spaltprodukte müssen nach dem Verlassen des Compacts noch die Brennstabwand passieren, um in das Kühlgas zu gelangen. Die Einheitszelle dieses Brennstoffdesigns ist in Abbildung 1.16a dargestellt.

Beim US-amerikanischen Design ist das Compact ein Vollzylinder. Diese sind in Bohrungen im Blockelement gestapelt. Sie stehen ebenfalls nicht mit dem Helium in Kontakt (siehe Abbildung 1.15). Der prismatische Graphitblock enthält separate Bohrungen für die Compacts und für das Kühlgas. Dabei sind die Brennstoffpositionen hexagonal im Block angeordnet und jede Kühlgasbohrung ist von sechs Brennstoffpositionen umringt. Vereinfachend lässt sich diese Anordnung auf eine zylinderförmige Geometrie abbilden. Die entsprechende Einheitszelle für das US-amerikanische Design ist in Abbildung 1.16b dargestellt.

In [SMI1974] wird die Einheitszelle für das US-amerikanische Brennstoffdesign durch zwei zylinderförmige Körper, die das Compact und die Kühlgasbohrung abbilden, und einen Stab, der das komplexe Gebilde zwischen beiden Zylindern vereinfacht abbildet, beschrieben. Alternativ kann die Einheitszelle mit einem zweidimensionalen Gitter überzogen werden.

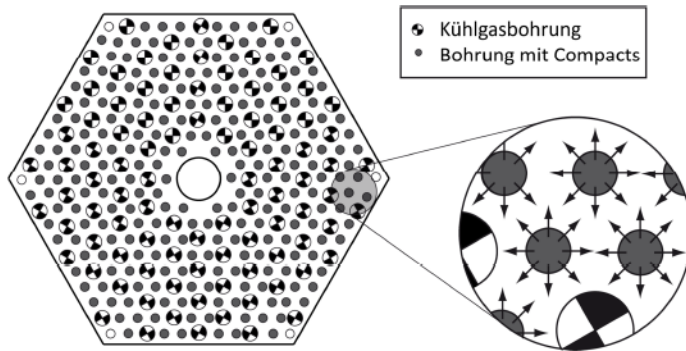


Abbildung 1.15: US-HTR-Brennstoffdesign in der Draufsicht (eigene Darstellung)

Der HTTR hat seit Inbetriebnahme eine überschaubare Betriebshistorie absolviert. Details der Betriebsweise sind nicht veröffentlicht, so dass der jetzige Anlagenzustand nicht präzise abgebildet werden kann. Im Rahmen einer Studie [VER2001] wurde das Spaltproduktfreisetzungverhalten im Normalbetrieb über 660 Volllasttage (VLT) simuliert. Der bei der Konzipierung der Anlage angedachte Betriebsplan wird auch „Standard Operation Plan“ genannt. Dabei beträgt die mittlere Kühlmittelaustragtemperatur in der Hochtemperaturphase, die von 220 bis 330 VLT geht, 950°C. Für die restliche Zeit sieht der Plan einen Anlagenbetrieb bei einer mittleren Kühlmittelaustrittstemperatur von 850°C vor.

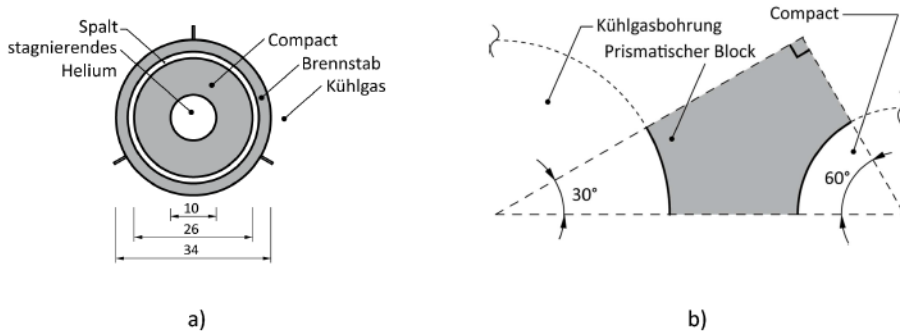


Abbildung 1.16: Einheitszelle bei prismatischen Blockreaktoren in der Draufsicht
a) japanisches HTTR-Brennstoffkonzept (Angaben in mm)
b) US-amerikanisches Brennstoffkonzept [SMI1974] (eigene Darstellung)

Um später einen Vergleich mit den in [VER2001] dargestellten und mit FRESCO-II berechneten Ergebnissen zu ermöglichen, folgt hier eine Kurzbeschreibung der Einschränkungen und Randbedingungen, die in dieser Studie getroffen wurden. Des Weiteren wird kurz auf die Notwendigkeit der FRESCO-II-Modellerweiterung eingegangen.

Zur Ermöglichung der Freisetzungsberechnung für den HTTR mit FRESCO-II wurde eine Reihe von Vereinfachungen gemacht. Da das Programm die instationäre Fick'sche Diffusionsgleichung nur für eine sphärische Geometrie löst, wurde das zylinderförmige Compact durch eine Kugel angenähert, wobei deren Radius so festgelegt wurde, dass das Kugelvolumen mit dem Volumen des Compacts übereinstimmt. Wie allerdings [LUE2000] zeigt, müsste streng genommen das Volumen des hohlen Compacts durch ein effektives Volumen ersetzt werden. Da allerdings die Rückhaltefähigkeit des

Matrixgraphits für die betrachtete Nuklide jedoch von untergeordneter Bedeutung ist, ist diese Vereinfachung für diese Nuklide zulässig. Der programminterne, statische Aufbau eines Brennelements sieht stets eine äußere brennstofffreie Zone vor, auch wenn diese beim Compact gar nicht existiert. Die Zone wurde möglichst klein gewählt (0,2 mm), um den Einfluss einer Spaltprodukt-rückhaltung im Graphit möglichst gering zu halten. Des Weiteren konnte der Hohlraum auf der Innenseite nicht abgebildet werden.

Das Freisetzungsverhalten aus einer Kugel weicht im Allgemeinen erheblich von dem aus zylinderförmigen Körpern ab. In Abbildung 1.17a ist die zeitliche Entwicklung der kumulativen Freisetzung bezogen auf die kumulative Freisetzung im Gleichgewichtszustand am Ende dargestellt.

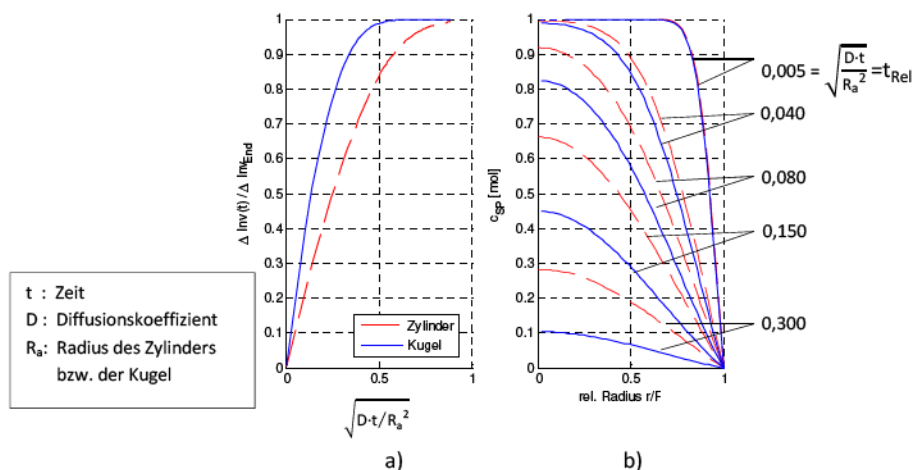


Abbildung 1.17: Vergleich der diffusionsbedingten Spaltproduktfreisetzung aus einem Vollzylinder (rot) bzw. einer Vollkugel (blau)

a) Vergleich der zeitlichen Entwicklung der kumulativen Freisetzung bezogen auf die kumulative Freisetzung am Ende

b) Vergleich der Konzentrationsprofile für verschiedene Werte der dimensionslosen Zahl (t_{Rel})

Der Ausgangszustand dieses analytisch lösbaren Falles ist ein konstantes Konzentrationsprofil ($c_{\text{SP},0}$) über den Radius. Danach liegt eine konstante Konzentration $c_{\text{SP,Konst}}$ im umgebenden Kühlmedium vor, die unterhalb der Konzentration im Zylinder liegt. Die in das Kühlmedium abgeflossene Menge wird demnach nicht bilanziert. Die radialen Konzentrationsprofile sind für verschiedene Zeitpunkte in Abbildung 1.17b dargestellt. Die Freisetzung ist in Abhängigkeit von einer dimensionslosen Größe, die bei gegebener Diffusionskonstante und Radius lediglich eine Funktion der Zeit ist, dargestellt. Diese lautet:

$$f(t) = \frac{D \cdot t}{R_a^2} \quad 1.15$$

mit:

D	- Diffusionskoeffizient	$[\text{m}^2/\text{s}]$
t	- Zeit	$[\text{s}]$
R_a	- Außenradius des Körpers	$[\text{m}]$

Abbildung 1.17a zeigt, dass die Freisetzung aus der Kugel im Vergleich zum Zylinder schneller erfolgt. Die dazugehörigen Konzentrationsverläufe für verschiedene Zeitschritte sind in Abbildung 1.17b) dargestellt. Auch hier ist zu sehen, dass der Ausgleich mit dem umgebenden Medium im Falle der Kugel schneller stattfindet und die Konzentration im Zylinder schneller abfällt. Demnach stellt die mit FRESKO-II durchgeführte Rechnung eine konservative Vorhersage für die Spaltproduktfreisetzung aus einem zylinderförmigen Compact dar. Für eine genauere, allgemeingültige bzw. Best-Estimate-Abschätzung wird allerdings eine genauere Beschreibung der zylindrischen Geometrie des Compacts benötigt.

1.6 Zielsetzung der Arbeit

Bisher wurden vornehmlich Worst-Case-Abschätzungen zu Fragenstellungen im Bereich HTR-Sicherheit gefordert. Die in den letzten Abschnitten beschriebenen Programme sind alle auf diese Aufgabe zugeschnitten, vereinfachen jedoch die realen Gegebenheiten stark und vernachlässigen freisetzungsmindernde Effekte. Unter anderem infolge beschränkter Rechenleistung und Speicherkapazitäten war es notwendig, die realen Verhältnisse stark zu abstrahieren.

Auch in der Sicherheitsstudie von Interatom für den HTR-Modul standen Worst-Case-Abschätzungen im Vordergrund [SIE1987, SIE1988b]. Vor allem bei den Freisetzungsrechnungen wurden im Vergleich zu anderen Themengebieten, z. B. der Fluidodynamik, wo eine räumlich aufgelöste Berechnung durchgeführt wurde, starke Vereinfachungen getroffen. So wurde auf Basis der Freisetzungsrechnung von einem einzigen Kugelbrennelement auf die Gesamtfreisetzungsrates des gesamten Gleichgewichtsscores geschlossen. Dabei wird implizit davon ausgegangen, dass alle Brennelemente sich wie das Brennelement mit der höchsten Temperaturbelastung und den höchsten Neutronenfluss verhalten. Die berechnete Freisetzungsrates kann nur als obere Grenze dienen. Zur Erfüllung stringenter Ziele bezüglich der Spaltproduktfreisetzung bei bestimmungsgemäßem Betrieb und unter Störfallbedingungen, ist zum Teil eine präzisere Berechnungsmethode notwendig.

Bedingt durch stochastische Verteilungen streuen die der Rechnung zugrunde liegenden Werte. Bei einer Best-Estimate-Rechnung wird demnach mit aktuellen, nach Stand von Forschungs- und Entwicklung bestimmten Schätzwerten gerechnet. Ergänzend werden Best-Estimate-Rechnungen durchgeführt, wobei durch die zusätzliche Analyse von Unsicherheiten die Zuschläge zu den Best-Estimate-Ergebnissen aufgezeigt werden. Die vorgestellten Programme, die alle nur einen Teilaspekt der gesamten Freisetzungskette betrachten, sind dieser Aufgabe nicht gewachsen. In den letzten Jahren wurden an anderen Institutionen die Rechenprogramme in dieser Hinsicht weiterentwickelt, wie z. B. *FIPREX-GETTER* [MER2006].

Um den neuen Anforderungen gerecht zu werden, ist es notwendig, die vorher beschriebenen Einzelprogramme zu koppeln und Defizite durch Erweiterungen zu beheben, damit sowohl Best-Estimate-Rechnungen als auch Worst-Case-Abschätzungen durchgeführt werden können. In Kapitel 2 werden Einzelaspekte behandelt, die sowohl für die Berechnung eines einzelnen Brennelements als auch eines gesamten Cores, eingesetzt werden können. Eine räumlich hochaufgelöste Freisetzungsrechnung benötigt die Betrachtung vieler Kugelbrennelemente. Die Aspekte, die eine räumlich aufgelöste Freisetzungsrechnung ermöglichen, werden in Kapitel 3 besprochen.




2 Programmsystem STACY

2.1 Entwicklung von STACY aus existierenden Einzelprogrammen

Die ursprünglichen Programme FRESKO-I, FRESKO-II, PANAMA und SPATRA wurden alle am Forschungszentrum Jülich entwickelt und beschreiben verschiedene Aspekte in der Simulationskette der Spaltproduktfreisetzungsberechnung. Obwohl jedes Programm nur einen Teilausschnitt des Gesamtproblems beschreibt, gibt es eine Reihe von Überlappungen bei den Funktionalitäten. Dabei bilden die Ergebnisse über den gesamten Betrachtungszeitraum des einen Programms einen Teil der Eingabe des nachfolgenden Programms. Die Kopplung erfolgt demnach über Ein- und Ausgabedateien, wobei eine Rückkopplung an vorgelagerte Programme nicht möglich ist. Des Weiteren waren die Programme, teils auf bestimmte HTR-Konzepte und Anwendungsfälle beschränkt. Sie waren somit nicht in der Lage, alle für einen modularen HTR relevanten Prozesse zu beschreiben.

Das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Programmpaket *Source Term Analysis Code System (STACY)* vereint alle Funktionalitäten der vorher genannten separaten Programme und enthält zudem einige Weiterentwicklungen. In Tabelle 2.1 werden die wichtigsten Teilaspekte der einzelnen Programme aufgelistet, die als Grundbausteine in STACY wieder Verwendung finden.

Tabelle 2.1: In STACY genutzte Funktionalitäten der Ausgangsprogramme:

-  Funktion in Ausgangsprogramm nicht vorhanden (keine Aufgabe dieses Programms)
-  Funktion in Ausgangsprogramm vorhanden und in STACY verwendet
-  Funktion in Ausgangsprogramm vorhanden und nicht in STACY verwendet

Modell	Programm			
	PANAMA	FRESKO-I	FRESKO-II	SPATRA
Spaltproduktfreisetzung aus einem Kugelbrennelement (Fick'sche Diffusionsrechnung)		✗	✓	
Spaltproduktfreisetzung aus dem Partikelkern mittels analytischer Gleichung	✓			
Partikelbruchanteil	✓			
Ablagerung auf metallischen Oberflächen				✓
Transport mittels Kühlgas		✓		
Ablagerung auf Reflektoroberflächen / Diffusion im Reflektorgraphit		✓		
Modellierung der SiC-Korrosion	✗		✓	
Eingabekonzept	✗	✗	✗	✗
Ausgabekonzept	✗	✗	✗	✗

Der Transport von Spaltprodukten mittels Kühlgas war in FRESKO-I nicht vollständig umgesetzt. Durch die Kombination der Programme können Rückkopplungseffekte in der Simulation mit einbezogen werden. Durch die Kopplung zusätzlicher Programme (z. B. Abbrandcode, Fluidodynamik) können weitere physikalische Details untersucht werden. So kann beispielhaft folgender Effekt erst

bei einer Kopplung betrachtet werden. Bei einem HTR hoher Leistung steigt die Brennstofftemperatur auf ein Niveau an, bei dem mit stark erhöhten Partikelbruchanteilen zu rechnen ist. Einige flüchtige Nuklide, die aufgrund der moderaten Halbwertszeit maßgeblich am Anfang des Störfalls zu der Nachzerfallsleistung beitragen, werden aufgrund des erhöhten Partikelbruchanteils weniger gut im Brennelement zurückgehalten (siehe Abbildung 2.1). Ein erhöhter Teil dieser Nuklide entweicht und trägt nicht mehr zu der Nachzerfallsleistung im Reaktor bei. Bei Berücksichtigung dieses Effekts könnten die Störfalltemperaturen also niedriger ausfallen.

Laut [KRA1990] wurde in der Vergangenheit schon versucht, diesen Effekt in THERMIX abzubilden. Bei dem Reaktorkonzept PNP-500 rechnete man aufgrund der recht hohen Freisetzungsrates von Kr-85 in den ersten zwei Tagen nach Störfallbeginn mit einer Reduktion der Nachzerfallsleistung um 15 [KRA1990]. In Anhang 3 wird gezeigt, dass dieser Wert erst nach 200 Stunden erreicht wird und der Anteil vorher niedriger ist. Die Umsetzung der Beschreibung dieses Effektes in THERMIX [BAN1983] war allerdings rudimentär. Erst durch eine Kopplung mit einem Abbrandcode kann dieser Effekt vollständig berücksichtigt werden. Diese Erweiterung wird in Abschnitt 2.5.3 besprochen.

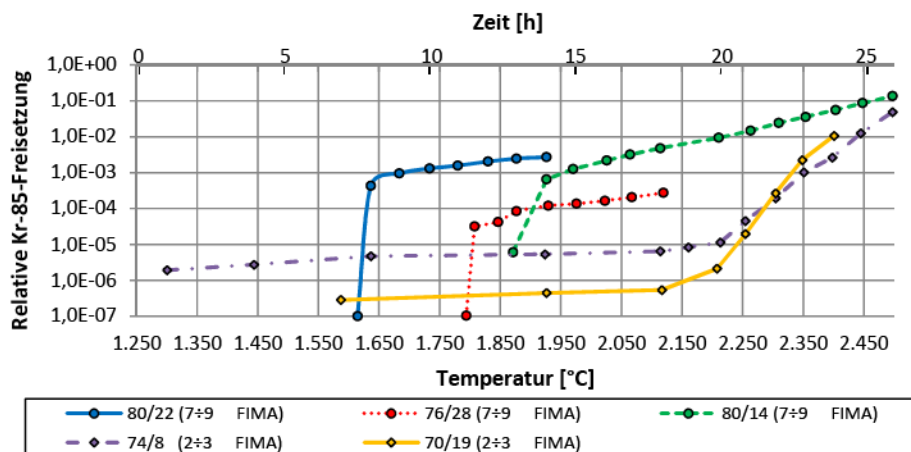


Abbildung 2.1: Krypton-85-Freisetzungsanteil während der Aufheizung von AVR-Brennelementen mit UO_2 -TRISO-Partikeln [SCH1989b] (eigene Darstellung)

Des Weiteren war die Dokumentation der untersuchten Programme sehr limitiert und nicht immer ausreichend. Für einige Programme (FRESCO-I, FRESCO-II und PANAMA) existiert ein Benutzerhandbuch, SPATRA wird hingegen nur kurz in einigen Veröffentlichungen bzw. Studien angesprochen. Eine Reihe von Details sowie die konkrete Umsetzung der Modellierung im Quellcode fehlten jedoch bei jedem Programm.

Um eine einwandfreie Kopplung und Weiterentwicklung des Programmpakets bei gleichzeitiger Gewährleistung der Reproduzierbarkeit bestehender Simulationsergebnisse zu ermöglichen, wurden die Programme sukzessive nach einem evolutionären Ansatz umgestellt. Dabei wurden gleichzeitig sowohl Modelldetails aus dem Quellcode extrahiert, als auch eine komplette sprachliche und strukturelle Umstellung des Quellcodes auf FORTRAN 2003 durchgeführt. Weiterer Vorteil des erstellten Freisetzungssimulationsmoduls ist, dass es nun ein integriertes Softwarepaket ist.

2.2 Verifikation von STACY an den Einzelprogrammen

Die Einzelprogramme wurden in der Vergangenheit gegen zahlreiche Experimente validiert und gegen andere Programme verifiziert. Während der Umstellung des Quellcodes wurde mit Hilfe automatisierter Testrechnungen sichergestellt, dass die Ergebnisse der Programme reproduziert wurden. In Abbildung 2.2 ist beispielhaft die Gegenüberstellung einer Benchmark-Rechnung mit STACY im Vergleich zu den Simulationsergebnissen mit FRESKO II sowohl unter dem Betriebssystem Windows (FRESKO-II) als auch unter Unix (Original) dargestellt.

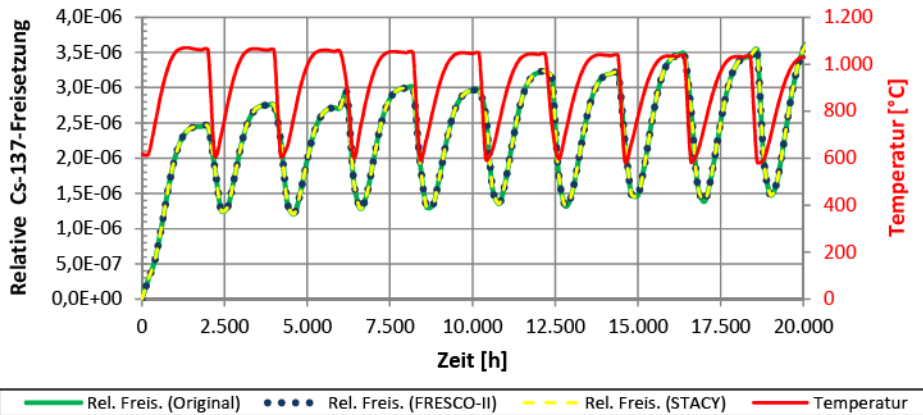


Abbildung 2.2: Beispiel des Vergleichs der Ergebnisse einer Freisetzungsrechnung mit FRESKO-II und STACY

Bei diesem Benchmark wird einem Kugelbrennelement ein berechneter zeitlicher Temperaturverlauf aufgeprägt. Der zeitliche Verlauf der relativen Freisetzung berechnet mit STACY ist deckungsgleich mit dem Ergebnis einer neu durchgeführten FRESKO-II-Rechnung (FRESKO-II) und mit dem Ergebnis einer noch vorhandenen Ausgabedatei (Original).

Aufgrund der großen Datenmenge, die bei einer räumlich aufgelösten Simulation eines HTR anfällt, wurden größere Teile des Programms auf ein objektorientiertes Datenmodell umgestellt. Vorteil dieses Ansatzes ist, dass die Daten und Rechenalgorithmen (Methoden) klar geordnet sind. Dieser Ansatz kommt bei einem Softwaremodul dieses Umfangs voll zum Tragen. Als Beispiel eines solchen Objekts ist das Brennelement-Objekt zu sehen, wobei die Funktionalität einiger Routinen davon abhängt, ob ein kugelförmiges Brennelement oder ein zylindrisches Compact betrachtet wird. Des Weiteren wurde ein neues Eingabekonzept entwickelt. Als Zwischenlösung auf dem Wege zum endgültigen Eingabekonzept für das HTR Code Package (HCP) wurde ein Eingabekonzept basierend auf dem bestehenden ASCII-Format entwickelt.

2.3 Vergleich mit in Heiztests gemessenen Freisetzungsraten

Die in STACY eingeflossenen Programme FRESCO-II und PANAMA wurden in vielen Rechnungen und Experimenten verifiziert und validiert. Nach der kompletten Umstellung und Kopplung der Einzelprogramme wird an dieser Stelle gezeigt, dass die daraus resultierende Software geeignet ist, Nachbestrahlungstests (*Post Irradiation Examination, PIE*), an einem Kugelbrennelement nachzurechnen.

Im Gegensatz zu Laborversuchen, bei denen Transportdaten einer einzelnen Schicht ermittelt werden können, wird bei einem Integraltest das Zusammenwirken aller Barrieren messtechnisch untersucht. Unter Integraltest fallen z. B. „In-pile-Loops“, Bestrahlungsversuche in Materialtestreaktoren (*MTR*) oder Leistungsreaktoren und Ausheiztests. Sollen konservative Aussagen getroffen werden, z. B. im Rahmen von Sicherheitsstudien, werden häufig Eingabedaten großzügig mit Unsicherheitsbandbreiten versehen. Dies führt dazu, dass die Freisetzung von Radionukliden in der Regel überschätzt wird. Durch den Vergleich von Messdaten aus Integralversuchen mit Simulationsergebnissen wurden zu pessimistische oder optimistische Annahmen in den Programmen korrigiert [JEN1975].

Kurzbeschreibung der Kühlfinger-Apparatur

Das Freisetzungsverhalten eines HTR-Brennelements unter Störfallbedingungen wird mittels einer Kühlfinger-Apparatur (*KüFA*) gemessen. Die erste KüFA wurde am Forschungszentrum Jülich in Betrieb genommen. Mit dem Ende des deutschen HTR-Forschungsprogramms wurden auch die KüFA-Aktivitäten in Jülich im Jahre 1983 beendet [FRE2010]. Im Rahmen eines europäischen Forschungsprogramms wurde ein baugleicher Ofen mit verbesserter Messtechnik am Institut für Transurane (*ITU*) in Karlsruhe aufgebaut und in Betrieb genommen [FRE2010]. Bei dieser Versuchsanlage werden zuvor bestrahlte kugelförmige HTR-Brennelemente oder Brennelement-compacts bei Umgebungsdruck in einer Heliumatmosphäre bei Temperaturen bis zu 2.000°C geheizt, wobei die Freisetzung von Spaltgasen sowie fester Spaltprodukte gemessen wird [FRE2010]. Aufgrund der hohen Aktivität der zu vermessenden Brennelemente befindet sich die Anlage in einer sogenannten Heißen Zelle, wo die Anlage durch Abschirmvorkehrungen von der Umgebung getrennt ist (siehe Abbildung 2.3).

Des Weiteren ist ein in vertikaler Richtung beweglicher Kühlfinger oberhalb des Probekörpers installiert. Auf der Unterseite dieses Fingers kann eine auswechselbare Platte angebracht werden, auf der leicht-kondensierbare Spaltprodukte, z. B. Cs-134, Cs-137, Sr-90, I-131 und Ag-110m, sich mit einem elementspezifischen Wirkungsgrad ablagern. Für Cs-134, Cs-137, I-131 und Ag-110m beträgt der Ablagerungswirkungsgrad etwa 70 [FRE2010]. Für Strontium ist der Wirkungsgrad mit 20 [FRE2010] deutlich geringer. Trotz hoher Ofentemperatur liegt die Plattentemperatur dank effizienter Wasserkühlung unter 100°C [FRE2010]. Durch spezielle Vorrichtungen können die Kondensatplatten ausgeschleust werden. Je nach akkumulierter Aktivität auf der Platte werden die eingesetzten Platten in einem Labor mit niedrigem Strahlungshintergrund (bei geringer Aktivität der Probe) bzw. Handschuhkasten (bei hoher Aktivität) mit einem Germaniumdetektor vermessen. Je nach Heizprogramm, üblicherweise mindestens einmal täglich, wird die Kondensatplatte gewechselt [FRE2010]. Zentraler Punkt der Anlage ist der Ofen, der aus einem inneren Gasleitzyylinder, einem umgebenden Heizelement, das in einem wassergekühlten Kupferblock fixiert ist, und außen liegenden Hitzeschildern besteht [FRE2010].

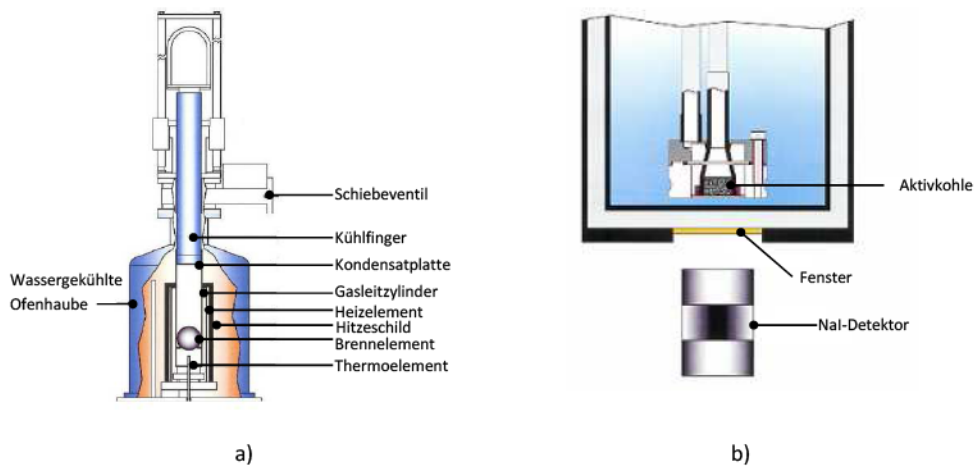


Abbildung 2.3: a) Schematische Darstellung der KüFA-Apparatur [FRE2010]
b) Kühlfalle zum Auffangen gasförmiger Spaltprodukte [FRE2010]

Nicht nur leicht kondensierbare Spaltprodukte können durch die Anlage erfasst werden. Während des Versuches wird die Anlage kontinuierlich mit Helium gespült, wobei das Brennelement von der Unterseite her umströmt wird. Die Heliumtemperatur wird entsprechend des Heizprogrammes nachgefahren [SEE2013]. Schließlich sammelt sich das Helium unterhalb der Haube an. Hier wird es von einer Membranpumpe angesaugt und in eine durch Stickstoff temperierte Kühlfalle gefördert. Bei der dort herrschenden Temperatur kondensieren die aus dem Brennelement freigesetzten Spaltgase, wie z. B. Krypton- und Xenon-Isotope, die nicht auf den Kühlfinger abgelagert werden, auf Aktivkohle aus und können anschließend in-situ gemessen werden.

Die Messung der Spaltgase wird als Maß für die Präsenz von Defektpartikeln herangezogen. Durch das vollständige Versagen einer Partikelbeschichtung werden gasförmige Nuklide schlagartig freigesetzt, was sich in einem Freisetzungsdiagramm als Aktivitätssprung bemerkbar macht. Dagegen deutet ein allmählicher Anstieg der Kryptonfreisetzung eher auf das Versagen der SiC-Schicht hin, während die äußere PyC-Schicht noch intakt ist und eine Diffusionsbarriere für das Krypton darstellt.

Zu Beginn eines Versuches wird das Brennelement für eine kurze Zeit von etwa sechs Stunden auf 300°C aufgeheizt, um Wasser und Verunreinigungen aus dem Brennelement auszutreiben. Danach wird die Ofentemperatur entsprechend dem festgelegten Heizprogramm eingestellt, um den Ausgangszustand für eine Störfalltransiente zu simulieren.

Versuch HFR-K3/3

Das Brennelement wurde zusammen mit drei anderen Brennelementen im HFR High Flux Reactor (HFR) in Petten über 359 Tage bei Nennleistung und einer Temperatur zwischen 700°C an der Oberfläche und 920°C im Zentrum (gerechnet) bestrahlt. HFR-K3 startete am 15. April 1982 und wurde am 5. September 1983 erfolgreich beendet. Die kumulierte schnelle Neutronenfluenz betrug $5,9 \cdot 10^{25} \text{ n/m}^2$ ($E > 0,1 \text{ MeV}$) und es wurde ein Abbrand von 10,6 FIMA erreicht. Weitere Eckdaten des Brennelements HFR-K3/3 sind in Tabelle 2.2 dargestellt.

Die während der Bestrahlung gemessenen Freisetzung- zu Entstehungsraten weisen darauf hin, dass aller Wahrscheinlichkeit nach kein Partikel während der Bestrahlung versagt hat.

Für diesen Versuch, der schon mehrfach für Benchmark-Rechnungen herangezogen wurde ([IAEA1997, IAEA2012, MER2009]), ist die Datenlage als gut einzustufen. Aus diesem Grund ist dieser Versuch als Beispiel zur Überprüfung des STACY-Codes gut geeignet.

Tabelle 2.2: Daten des Brennelements HFR-K3/3

Schwermetallgehalt	10,22 g
U-235-Anreicherung	9,82 gew.-
Gesamtanzahl Partikel	16.350
Anzahl Defektpartikel	0
mittlere Zentraltemperatur während der Bestrahlung	920°C
maximale Leistung während der Bestrahlung	3,61 kW _{th}

Das Brennelement HFR-K3/3 wurde in zwei Phasen über insgesamt 100 Stunden bei 1.800°C geheizt. Abbildung 2.4 zeigt die gemessenen relativen Freisetzungsteile sowie die Daten der FRESCO-II-Rechnung [IAEA2012] und die Ergebnisse der eigenen FRESCO-II-Rechnung. Die Ergebnisse der beiden FRESCO-II-Rechnungen sind deckungsgleich. Die STACY-Rechnung mit null Defektpartikeln zu Beginn des Heiztests ist ebenfalls deckungsgleich mit den FRESCO-II-Ergebnissen, da die gleichen Eingaben genutzt wurden. Als Parameterstudie wurde davon ausgegangen, dass ein Partikel schon während der Bestrahlungsphase versagt hat. Dies führt dazu, dass die berechnete Freisetzung während des ersten Temperaturanstiegs auf 1.800°C den gemessenen Freisetzungswert nach ungefähr 34 Stunden noch besser trifft.

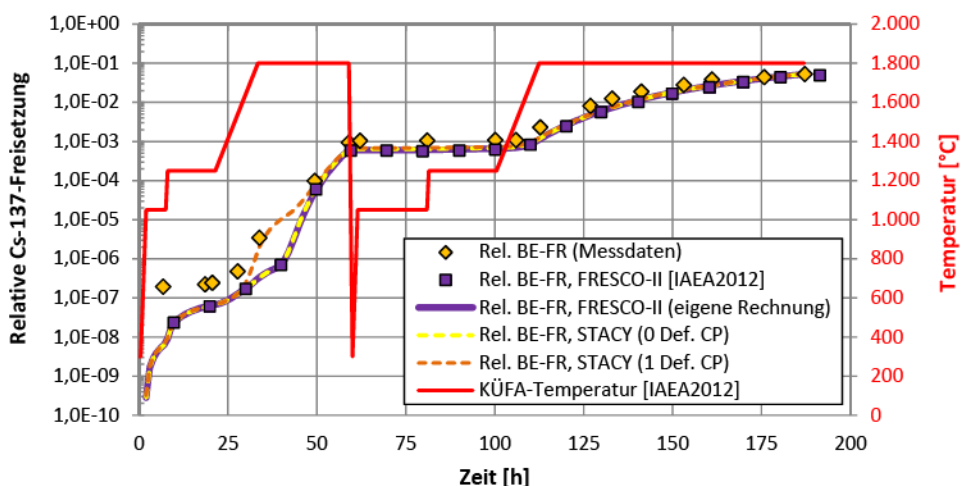


Abbildung 2.4: Vergleich von gemessenen und mit Hilfe von FRESCO-II und STACY berechneten Cs-137-Freisetzungsteile während des Heiztests HFR-K3/3

In den bisher gezeigten FRESCO-II und STACY-Rechnungen des Versuchs wurde von einer konstanten Bestrahlungstemperatur von 700°C ausgegangen. Detaillierte Studien von Venter und Christ haben zu den in Abbildung 2.5 dargestellten Kurven geführt [MER2009]. Zu sehen ist, dass die Spaltleistung im Vergleich zum modularen HTR aufgrund des abweichenden Neutronenflussspektrums im HFR deutlich höher liegt, wodurch das Brennelement den Zielabbbrand früher erreicht. Dies führt zu einem

ausgeprägteren radialen Temperaturprofil im Brennelement. Die ermittelten Brennstofftemperaturen liegen im Vergleich zu der in früheren Rechnungen verwendeten Temperatur für jeden Zeitpunkt und für das gesamte Brennelementvolumen deutlich höher.

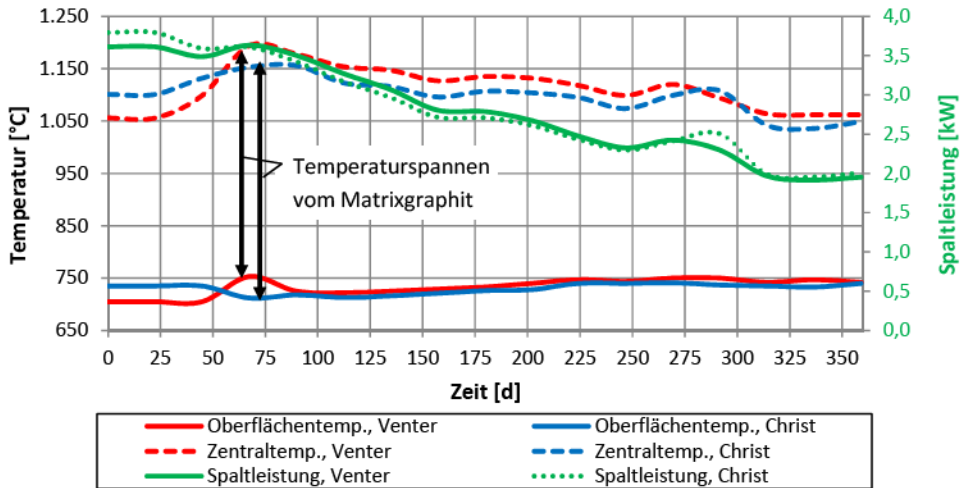


Abbildung 2.5: Gegenüberstellung der zeitlichen Verläufe der Spaltleistungen, Zentraltemperaturen und Oberflächentemperaturen des Brennelements HFR-K3/3 während der Bestrahlung im HFR nach Christ und Venter [MER2009] (eigene Darstellung)

Die Verwendung der von Christ und Venter berechneten Brennstofftemperaturverläufe aus [MER2009] unter Verwendung des radialen Temperaturprofils in der Freisetzungsrechnung mit STACY führt zu den in Abbildung 2.6 dargestellten Freisetzungsverläufen.

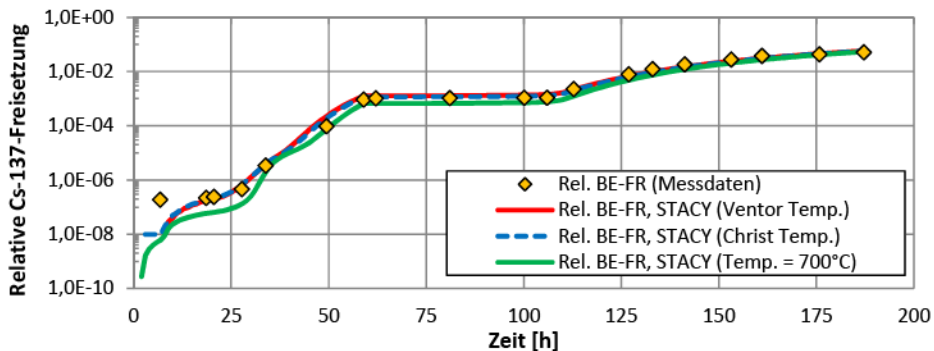


Abbildung 2.6: Mit STACY berechnete Cs-137-Freisetzungsanteile während des Heiztests von HFR-K3/3 (Verwendung der in [MER2009] veröffentlichten Temperaturverläufe während der Bestrahlungsphase oder einer konstanten Bestrahlungstemperatur von 700°C)

Die Freisetzungsverläufe der beiden Rechnungen mit höheren Brennstofftemperaturen sind trotz der Temperaturunterschiede, deckungsgleich. Aufgrund der höheren Brennstofftemperaturen während der Bestrahlungsphase tritt ein größerer Teil des Inventars aus den Coated Particles aus. Bei Anhebung der Temperatur in der KüFA resultiert dies in einer höheren Freisetzung zu Beginn des

Heiztests. Die Messdaten werden insgesamt sehr gut getroffen. Die Nachrechnung des Versuchs zeigt, dass STACY ein geeignetes Werkzeug ist, um das Spaltproduktfreisetzungverhalten dieses Brennelements zu beschreiben.

Versuch HFR-EU1bis/5

Der bis dato aktuellste Ausheizversuch wurde 2009 am Institut für Transurane (ITU) in Karlsruhe durchgeführt. Das Brennelement HFR-EU1bis/5 wurde mit vier anderen Brennelementen über etwa 249 Tage im HFR High Flux Reactor (HFR) in Petten bei einer Temperatur von 1.250°C bestrahlt [SEE2012]. Anschließend wurde dem Brennelement der in Abbildung 2.7 gezeigte Temperaturverlauf in der KÜFA aufgeprägt. Der Verlauf kann in fünf Phasen unterteilt werden. In der ersten Phase wird das Verhalten bei typischen maximalen Temperaturen unter Normalbetriebsbedingungen im Reaktor simuliert. In der zweiten Phase wird das Verhalten bei erhöhter Temperatur (950°C, 1.050°C und 1.250°C) simuliert. Die Cs-137-Beladung von insgesamt 51 Kondensatplatten wurde vermessen. Die Ergebnisse aus [SEE2012] sind in Abbildung 2.7 dargestellt. Daran anschließend wurde das Brennelement über 90 Stunden bei einer Störfalltemperatur von 1.500°C ausgeheizt. In der dritten Phase wird die Störfalltemperatur weiter erhöht. Die vierte Phase enthält eine Reihe schneller Temperaturtransienten, um eine Freisetzung von Krypton zu forcieren [SEE2012].

Die relative Freisetzung von Cs-137 ist direkt am Anfang des Versuches im Vergleich zu bisherigen Experimenten vergleichsweise hoch. Dagegen wurde bis zum Ende der dritten Phase keine nennenswerte Kr-85-Freisetzung festgestellt. Trotz schneller, kurzer Temperaturtransienten trifft dies auch für die daran anschließenden Phasen vier und fünf zu [SEE2012]. Dies steht im starken Kontrast zu den Ausheizergebnissen der anderen Brennelemente aus dem Bestrahlungsexperiment HFR-EU1bis. Allerdings wird eine Leckage der Behälter, die den Stickstoff zur Kühlung der Kühlfalle fassen, vermutet [SEE2012]. Demnach sind diese Kr-85-Freisetzungswerte möglicherweise nicht zu Aussagen über Partikeldefekte geeignet. Es wird aber angenommen, dass während dieses Ausheiztests ebenso wie bei den anderen EU1bis Ausheiztests kein Druckkesselversagen von Partikeln aufgetreten ist.

Auf Basis der Eingangsdaten wurde der Ausheizversuch inklusive Bestrahlungsphase mit STACY abgebildet. Während der Bestrahlungsphase wurde der präzise Temperaturverlauf nicht nachgefahren, sondern es wurde eine konstante Temperatur von 1.250°C angenommen. Die Ergebnisse der relativen Cs-137-Freisetzung unter der Annahme von null Defektpartikeln sind in der grünen Kurve in Abbildung 2.7 dargestellt. Das gemessene Freisetzungsniveau am Anfang des Versuches wird durch die Simulation nicht getroffen. Es liegt knapp unterhalb der relativen Freisetzung, die sich bei der Addition der freigesetzten Stoffmenge in der Bestrahlungsphase ergibt. Selbst mit der Annahme von zehn Defektpartikeln zu Beginn des Ausheiztests lässt sich die gemessene Freisetzungsrage nicht erklären (siehe Abbildung 2.7, blaue Kurve). Auch eine Erhöhung der Temperatur über 10 Stunden auf 1.400°C gegen Ende der Bestrahlungsphase kann das hohe Freisetzungsniveau am Anfang des Heiztests nicht erklären. Messungen der Gasfreisetzung in der Bestrahlungsphase weisen nicht auf Partikelversagen hin. Bedingt durch eine Temperaturexkursion in einem Zyklus des Bestrahlungsexperiments bestehen hier auch Ungewissheiten. Die gemessene Freisetzungsrage wird ab der Mitte der zweiten Phase durch die Simulation konservativ abgedeckt. Die temperaturbedingten Anstiege der Cs-137-Freisetzung werden durch die Simulation recht gut abgebildet.

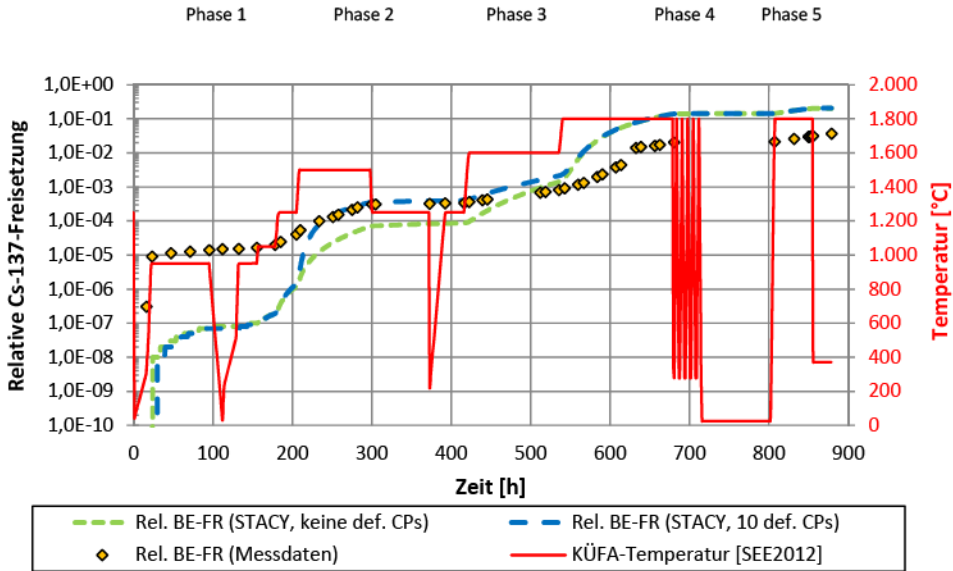


Abbildung 2.7: Vergleich der experimentell bestimmten Cs-137-Freisetzung mit der STACY-Simulation vom Versuch HFR-EU1bis/5

Es wird vermutet, dass neben Druckkesselversagen andere Versagensmechanismen eine Rolle gespielt haben. So wäre es denkbar, dass bei einigen Partikeln zwar die SiC-Schicht versagt hat bzw. beschädigt ist, aber ein Bersten dieser Partikel bzw. ein gleichzeitiges Versagen aller Beschichtungen nicht stattgefunden hat. Die Rückhaltefähigkeit des Partikels bei einer defekten SiC-Schicht und gleichzeitig noch intakter äußeren PyC-Schicht ist bzgl. Caesium zwar etwas reduziert, aber gasförmige Spaltprodukte werden durch die noch vorhandene Barriere nur verzögert freigesetzt. Durch die Temperaturerhöhung in der KüFA findet die Freisetzung beschleunigt statt. Diese Sorte Partikel wird sowohl in FRESKO-II als auch in STACY nicht modelliert. In beiden Programmen wird üblicherweise lediglich zwischen intakten und defekten Partikeln ohne jegliche Beschichtung unterschieden. Um eine nähere Deutung der Diskrepanzen zwischen gemessenen und simulierten Freisetzungsverläufen zu ermöglichen, wäre eine Abbildung von u. a. dieser Art von Partikelversagen empfehlenswert. Hierzu müsste eine zusätzliche Partikelsorte berücksichtigt werden. Bei dieser müsste der Diffusionskoeffizient in der SiC-Schicht im Vergleich zum anfänglichen Diffusionskoeffizient für ein intaktes Partikel aufgrund des Versagens dieser Schicht geändert werden.

2.4 Einbindung in das HTR Code Package

Die Entwicklung von STACY ist Teil der Entwicklung des HTR Code Package (HCP) [KAS2012a]. Der Großteil der bisher am FZJ entwickelten HTR spezifischen Simulationssoftware ist in FORTRAN 77 geschrieben. Sie ist in den letzten Jahrzehnten zwar inhaltlich an neue Anforderungen angepasst, allerdings nicht technisch modernisiert worden. Da einige Programmpakete aus verschiedenen einzelnen Programmen aufgebaut sind, die zu unterschiedlichen Zeitpunkten von verschiedenen Autoren entwickelt worden sind und somit alle ihre eigene Programmstruktur haben, lag eine sehr heterogene Code-Struktur vor. 2010 wurde die Entscheidung getroffen, aus den verschiedenen vorliegenden Programmen ein neues Programmpaket das HTR-Code Package (HCP) zu entwickeln.

Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Module STACY und SHUFLE sind zwei seiner Module (siehe Abbildung 2.8).

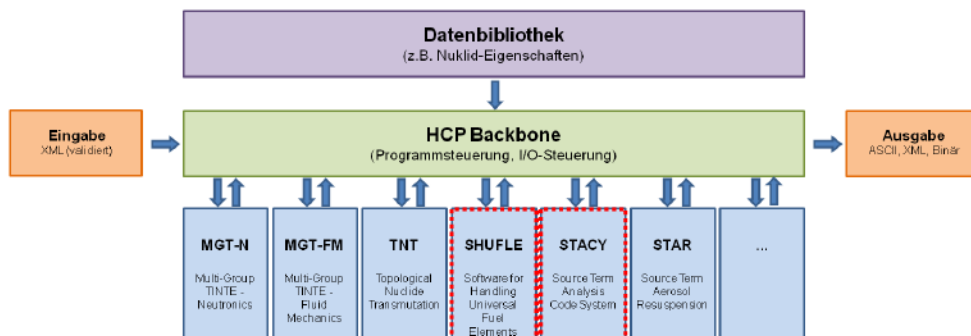


Abbildung 2.8: Übersicht über die Struktur des HTR Code Package [KAS2012a] (überarbeitet)

Der Aufbau des HCP ist vereinfacht in Abbildung 2.8 dargestellt. Beim HCP wird ein gemeinsames Hauptprogramm zur Ablaufsteuerung, Datenverwaltung und zum Schreiben und Lesen von Dateien entwickelt. Das Hauptprogramm steuert ebenfalls die separaten Simulationsmodule, die sich mit einzelnen physikalischen Aspekten eines HTR befassen.

Da die Entwicklung einiger wichtiger Komponenten des Programmpakets zum Zeitpunkt dieser Arbeit noch nicht abgeschlossen war, benötigt die STACY-Rechnung momentan noch Ergebnisse aus anderen Programmen zur Vervollständigung des Input-Datensatzes. Für die Simulation des Freisetzungsverhaltens im Core eines HTR unter Normalbedingungen ist das Modul auf eine I/O-Kopplung mit dem Programmpaket VSOP angewiesen. Für eine Freisetzungsrechnung unter Störfallbedingungen reichen je nach Störfall Daten aus VSOP, z. B. im Falle eines Druckentlastungsstörfalls, oder es wird eine MGT-3D-Rechnung benötigt.

2.5 Modellerweiterungen in STACY

Die auf Basis der Einzelprogramme entstandene Ausgangsversion des Moduls STACY wurde um zahlreiche Phänomene erweitert, um eine detailgetreuere Beschreibung des Spaltprodukt-freisetzungsverhaltens zu ermöglichen. Die wichtigsten dieser Erweiterungen werden in diesem Abschnitt vorgestellt.

2.5.1 Berechnung des Temperaturprofils im Brennstoffpartikel

Systemcodes wie VSOP berechnen lediglich das Temperaturprofil über den Brennelementradius. Aufgrund der hohen spezifischen Leistung in den Brennstoffpartikeln liegt im Brennstoffpartikel eine gewisse Temperaturüberhöhung gegenüber dem Matrixgraphit vor. So wird im PANAMA-Modell die konservative Annahme getroffen, dass die Temperatur im Brennstoffpartikel zu allen Zeiten 70 K über der Matrixtemperatur liegt [PRO1983]. Eine frühere Studie zeigt [PRA1964], dass die Temperaturdifferenz in einem Leistungsreaktor bei etwa 20 K liegt. Die höhere Temperaturdifferenz lässt sich nur in Materialtestreaktoren erreichen. Bei dem in [PRO1983] beschriebenen Experiment wurden Partikel untersucht, die als Teil einer losen Packung, in Compacts oder in einem kugelförmigen Brennelement bestrahlt wurden. Somit kann davon ausgegangen werden, dass

zumindest die Compacts und Partikel in der losen Packung in einem Materialtestreaktor bestrahlt wurden, da diese nicht in den AVR eingebracht werden können. Aufgrund des vom HTR abweichenden Neutronenflussspektrums wird der Zielabbrand im Vergleich zum HTR schneller erreicht, und die mittlere Leistung eines Partikels ist somit deutlich höher. Die Temperaturüberhöhung von 70 K im Partikel aus [PRO1983] erscheint unter der Annahme, dass ein Teil der untersuchten Partikel in einem Materialtestreaktor bestrahlt wurden, plausibel.

Allerdings weicht diese angenommene Temperaturüberhöhung im Rahmen einer Best-Estimate-Rechnung für Partikel, die in einem Leistungsreaktor eingesetzt werden, stark von der Realität ab. Des Weiteren geht die zeitliche Abhängigkeit der Temperaturüberhöhung aufgrund schwankender Leistung verloren. In diesem Abschnitt wird ein Modell entwickelt, welches das Temperaturprofil und damit die Temperaturüberhöhung im Brennstoffpartikel berechnet.

Ausgehend von der Matrixtemperatur kann das Temperaturprofil in den Partikeln bestimmt werden. Nach einer Änderung der Partikelleistung wird ein neues stationäres Temperaturprofil innerhalb von Sekunden erreicht. Bei der Berechnung des Partikelbruchanteils bzw. der Spaltproduktfreisetzung spielen diese Zeitskalen keine Rolle. Eine stationäre Lösung der Fourier'schen Wärmeleitungsgleichung genügt somit in diesen Fällen für die Beschreibung des Temperaturprofils im Partikel. Diese Gleichung kann für eine sphärische Geometrie analytisch gelöst werden [ORT2009]. Im einfachsten Fall wird die Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von Temperatur und Abbrandzustand vernachlässigt. Hier genügt es, für jede Materialzone „i“ im Partikel eine Gleichung folgender Art aufzustellen [ORT2009]:

$$T_i(r) = -r^2 \cdot \frac{q_i}{6 \cdot \lambda_i} - \frac{C_{1,i}}{r \cdot \lambda_i} + C_{2,i} \quad 2.1$$

mit:	q_i	- nukleare Leistungsdichte	$[\text{W}/\text{m}^3]$
	λ_i	- Wärmeleitfähigkeit	$[\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})]$
	$C_{1,i}, C_{2,i}$	- Konstanten	$[\text{K} \cdot \text{m}], [\text{K}]$

Bei Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit wird jede Materialzone in weitere Rechenzonen unterteilt. Für die innerste Zone wird folgende Randbedingung am inneren Rand angesetzt:

$$\frac{\partial T_1(r)}{\partial r} = 0 \quad 2.2$$

Als weitere Randbedingung wird die Temperatur am äußeren Rand herangezogen:

$$T_1(r = r_2) = T_2 \quad 2.3$$

Mit diesen beiden Randbedingungen lassen sich die Koeffizienten $C_{1,1}$ und $C_{2,1}$ in Gleichung 2.1 bestimmen, wobei die Temperatur T_2 zunächst unbekannt ist. Für jede weitere Schale müssen diese Koeffizienten nun ebenfalls bestimmt werden. Am inneren Rand gilt für alle weiteren Schalen, dass der Wärmestrom am Materialübergang konstant bleibt:

$$\left. \frac{\partial T_i}{\partial r} \right|_{r=r_{i+1}} \cdot \lambda_i = \left. \frac{\partial T_{i+1}}{\partial r} \right|_{r=r_{i+1}} \cdot \lambda_{i+1} \quad 2.4$$

Die Vorgehensweise am rechten Rand ist identisch mit der in der ersten Schale. Bei den sich ergebenden Gleichungen ist die Temperatur am rechten Rand jeweils bis auf die äußerste Schale unbekannt. An dieser Stelle liegt die Matrixtemperatur vor. Aus der Abbranddifferenz lässt sich die mittlere Leistung eines Partikels in der Brennstoffzone bestimmen:

$$\bar{Q}_{CP} = \frac{(FIMA_k - FIMA_{k-1})}{n_{CPs}} \cdot \left(\frac{r_{CP}}{r_{Kernel}} \right)^3 \quad 2.5$$

mit: n_{CPs} - Anzahl Partikel im Brennelement
 r_{CP} - Radius des Partikels [m]
 $r_{CP-Kern}$ - Kernradius [m]
 $FIMA_k$ - Abbrand am Ende des k-ten Zeitschritt [FIMA]

Die Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit für Urandioxid von der Temperatur ist Gegenstand vieler Untersuchungen. In STACY wurde für die Wärmeleitfähigkeit des UO_2 -Kerns folgendes Polynom aus [RON1999] hinterlegt:

$$\begin{aligned} \lambda(T) = & 12,57829 - 2,31100 \cdot 10^{-2} \cdot T & [W/(m \cdot K)] \\ & + 2,36675 \cdot 10^{-5} \cdot T^2 - 1,30812 \cdot 10^{-8} \cdot T^3 & 2.6 \\ & + 1,63730 \cdot 10^{-12} \cdot T^4 - 3,90508 \cdot 10^{-16} \cdot T^5 \end{aligned}$$

mit: T - Temperatur [K]

Diese Funktion wurde empirisch aus Messdaten ermittelt (siehe Abbildung 2.9). Zu sehen ist, dass die Messdaten im dem für HTR relevanten Temperaturbereich bis ca. 1.000 K eine geringe Streuung aufweisen. Erst bei höheren Temperaturen sind die Schwankungen größer.

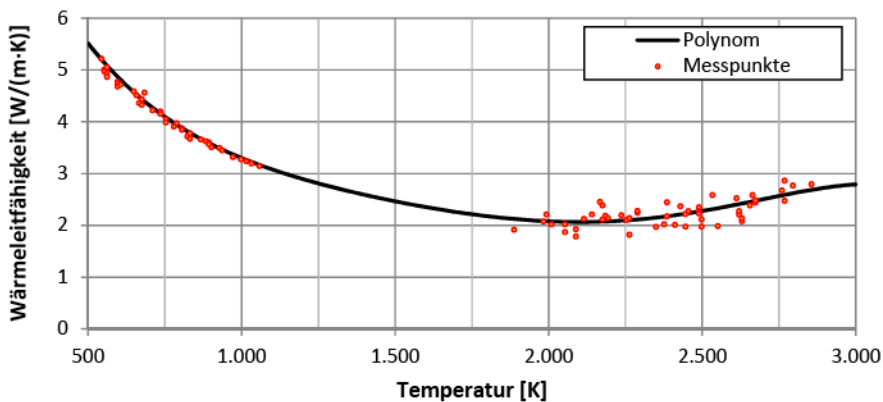


Abbildung 2.9: Wärmeleitfähigkeit von Urandioxid in Abhängigkeit von der Temperatur: Messdaten und der daraus ermittelte empirische Polynomansatz [RON1999] (eigene Darstellung)

Abbildung 2.10 zeigt den Verlauf der Temperaturdifferenz gegenüber der Brennstoffmatrix im Partikel für vier unterschiedliche Brennelementzustände. Dargestellt sind die Verläufe für ein kugelförmiges Brennelement im ersten und letzten Durchlauf, das jeweils nur über die Zentralachse

(15 x innen) bzw. nur entlang des Reflektors (15x außen) fließt. Die Zustände decken die möglichen Brennelementzustände in Bezug auf die Brennelementleistung ab. Die Abbildung zeigt, dass die größte Differenz gegenüber der Temperatur der Brennstoffmatrix beim ersten Durchlauf entlang der Mittelachse vorliegt. Die Temperaturdifferenz beträgt etwa 30°C. Dies zeigt, dass die bisherige Annahme in PANAMA sehr konservativ war.

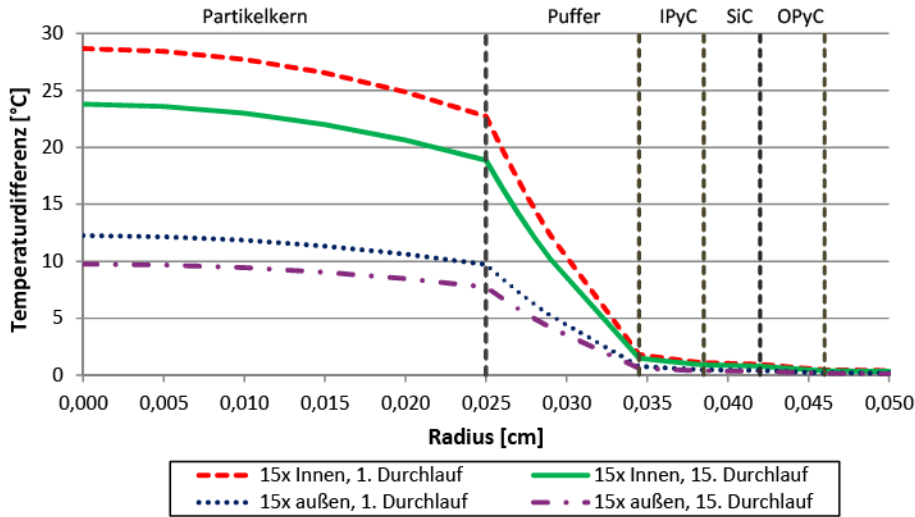


Abbildung 2.10: Differenz zwischen der Temperatur im Partikel und der in der Brennelementmatrix

Ausschlaggebend für die Berechnung der Partikelbruchanteile ist die Temperaturüberhöhung im Partikel, die sich vor allem auf die Berechnung des Partialdrucks von Kohlenmonoxid unter Störfallbedingungen auswirkt. In Abschnitt 1.4.3 wurde die Berechnungsvorschrift für die Anzahl Sauerstoffatome pro Spaltung (OPF) für den Normalbetrieb vorgestellt. Für den Störfall berechnet sich dieser Faktor nach folgender Gleichung [VER1985]:

$$\log(\text{OPF}) = -10,08 - \frac{8.500}{T_B} + 2 \cdot \log(t_B) - 0,404 \cdot \left(\frac{10^4}{T} - \frac{10^4}{T_B + \Delta T_B} \right) \quad 2.7$$

mit: t_B - Bestrahlungszeit [s]
 T_B - mittlere Bestrahlungstemperatur [K]
 T_B - mittlere Temperaturüberhöhung im Partikel (während der Bestrahlungszeit) [K]

Aus dem OPF-Wert bei Ende der Bestrahlung lässt sich dann rückwärts wiederum aus Gleichung 1.11 eine mittlere (konstante) Bestrahlungstemperatur errechnen. Die mittlere Temperaturüberhöhung T_B ist die Differenz aus der mittleren Bestrahlungstemperatur bei Berücksichtigung des zeitlichen Verlaufs der Temperaturüberhöhung und der mittleren Bestrahlungstemperatur ohne Berücksichtigung dieser Temperaturüberhöhung.

Abbildung 2.11 zeigt die berechneten Partikelbruchanteile für verschiedene Werte der Temperaturüberhöhung. Gleichzeitig zeigt die Abbildung den Verlauf des Partikelbruchanteils bei der für den HTR-Modul bestimmten mittleren Temperaturüberhöhung, die mit Hilfe des vorher beschriebenen Modells berechnet wurde. Über die gesamte Bestrahlungszeit beträgt die Differenz bei dem betrachteten HTR-Modul-Brennelement 11,5 K. Im Vergleich zu dem bislang in PANAMA genutzten Wert von 70 K ist diese mittlere Temperaturüberhöhung deutlich geringer. Dieser Unterschied wird einerseits verursacht durch die im Vergleich zum Materialtestreaktor zeitlich veränderliche Position, wodurch das Brennelement nicht immer der Maximaltemperatur ausgesetzt ist und andererseits durch das geringere radiale Temperaturgefälle im Partikel aufgrund der geringeren Partikelleistung im Leistungsreaktor.

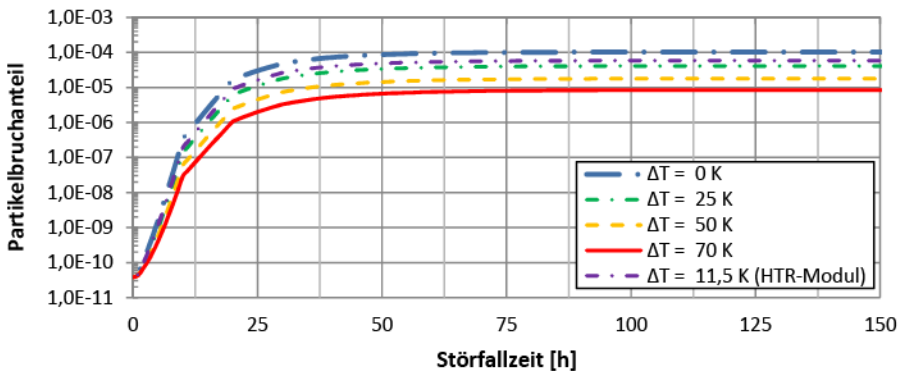


Abbildung 2.11: Partikelbruchanteil in Abhängigkeit von der Störfallzeit für verschiedene mittlere Temperaturüberhöhungen und für die berechnete Temperaturüberhöhung eines HTR-Modul-Brennelements

Durch die Berücksichtigung einer realistischen über die Bestrahlungszeit gemittelten Temperaturüberhöhung, wird der berechnete Partikelbruchanteil im Störfall bei diesem Brennelement um eine Größenordnung reduziert. Je nach Bestrahlungshistorie des Brennelements kann diese Differenz abweichen. Insgesamt hat eine detaillierte Betrachtung der Temperaturüberhöhung eine große Auswirkung auf den Partikelbruchanteil im Störfall.

2.5.2 Berücksichtigung des Temperaturprofils im Brennelement

Berechnung des Temperaturprofils

Um sowohl das Temperaturprofil in einem einzelnen Brennelement als auch die Berechnung dieses Profils für jedes Brennelement in der räumlich aufgelösten Rechnung eines gesamten Cores durchführen zu können, wurde die heterogene Brennelementtemperaturrechnung aus dem Programmpaket VSOP analysiert und an die anderen Module des HCP angepasst. Die Berechnung des Temperaturprofils wurde als Teil des STACY-Codes neu implementiert. In VSOP kann das Kugelbrennelement in maximal fünf Rechenzonen (Schalen) eingeteilt werden. Bei der Berechnung des Temperaturprofils in STACY ist die Anzahl Rechenzonen frei wählbar. Somit kann die Temperatur mit derselben Auflösung wie die Diffusionsrechnung bestimmt werden.

In der Brennelementtemperaturberechnung wird der Kugelradius durch verschiedene Stützpunkte aufgespannt. Die Gesamtleistung des Brennelements, die im Rahmen dieser Arbeit mit TNT

berechnet wurde, wird auf diese unterschiedlichen Schichten aufgeteilt. Dabei wird vereinfachend davon ausgegangen, dass die Leistungsdichte in der Brennstoffzone überall gleich ist und keine Leistung in der brennstofffreien Zone erzeugt wird. Jede Schale wird nochmals in eine innere und äußere Schale unterteilt (siehe Abbildung 2.12).

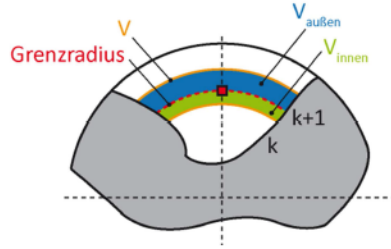


Abbildung 2.12: Einteilung der Schalen im Brennelement [CLE1986] (eigene Darstellung)

Der Grenzradius dieser beiden Schalen wird in VSOP durch den mittleren Radius festgelegt:

$$r_{\text{Mittl}} = 0,3 \cdot r_{\text{Mittl,arithm}} + 0,7 \cdot r_{\text{Mittl,geom}} \quad 2.8$$

wobei:

$$r_{\text{Mittl,arithm}} = \frac{r_{i+1} + r_i}{2}; \quad r_{\text{Mittl,geom}} = \sqrt{r_{i+1} \cdot r_i}. \quad 2.9$$

Es konnte nicht abschließend geklärt werden, wie sich die Faktoren in Gleichung 2.8 begründen lassen. Es wird aber vermutet, dass dies auf Basis empirischer Daten festgelegt wurde. Der Einfluss der Mittelwertbildung ist wie in Anhang 4 ausführlich beschrieben, vernachlässigbar. Die Volumina der inneren bzw. äußeren Schale berechnen sich nach:

$$V_{\text{innen}} = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot (r_{\text{Mittl}}^3 - r_{i-1}^3); \quad V_{\text{außen}} = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot (r_i^3 - r_{\text{Mittl}}^3) \quad 2.10$$

In der heterogenen Brennstofftemperaturrechnung wird für jede Schale folgende Gleichung aufgestellt:

$$(\rho \cdot c) \Delta V_k \frac{dT_k}{dt} = W_k \cdot (T_{k+1} - T_k) + W_{k-1} (T_{k-1} - T_k) + \dot{q}_n''' \cdot \Delta V_k \quad 2.11$$

mit:	ρ	- Materialdichte	$[\text{kg}/\text{m}^3]$
	C	- Wärmekapazität	$[\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})]$
	\dot{q}_n'''	- volumenspezifische Leistung	$[\text{W}/\text{m}^3]$

Die Gleichung bilanziert den Energieinhalt einer jeden Schale. Auf der linken Seite der Gleichung steht die zeitliche Änderung des Energieinhalts, die gleich der Summe aus dem Wärmetransport über die äußere bzw. innere Fläche und dem inneren Quellterm ist. Die Wärmeleiterterme W sind definiert durch:

$$W_k = \frac{4\pi \cdot r_k \cdot \lambda}{r_k - r_{k-1}} \quad 2.12$$

Am Übergang zum Kühlgas wird folgende Randbedingung angesetzt:

$$4\pi \cdot R_{BE}^2 \cdot \lambda \cdot \frac{\partial T}{\partial r} = \dot{Q}_{\lambda s} + \dot{Q}_{Konv} \quad 2.13$$

mit: R_{BE} - Brennelementradius [m]
 $\dot{Q}_{\lambda s}$ - Wärmeabfuhrate aufgrund der effektiven Wärmeleitung im Kugelhaufen [W]
 \dot{Q}_{Konv} - Wärmeabfuhrate durch Konvektion [W]

Aufgrund des geringen Temperaturgradienten in sowohl radialer als auch axialer Richtung ist der Netto-Wärmestrom zwischen benachbarten Brennelementen trotz hoher Temperatur vernachlässigbar. Zusammen bilden die Gleichungen ein tridiagonales Gleichungssystem der Dimension „ n_{Schale} “. Dies kann mit einem vereinfachten Gauß'schen Lösungsverfahren gelöst werden.

Im Gegensatz zu der üblichen Vorgehensweise in VSOP, in der vereinfachend angenommen wird, dass die gesamte Leistungsproduktion in der Brennstoffzone mit homogenisierter Leistungsdichte stattfindet, wird die Leistungsaufteilung in STACY detaillierter betrachtet. In VSOP ist der Abschirmfaktor in der Brennstoffzone gleich eins und in der brennstofffreien Zone gleich null. Damit ist die Leistungsdichte in der gesamten Brennstoffzone konstant. Bedingt durch die Unterteilung in eine innere und äußere Schale liegt in der Rechnung allerdings ein Bereich mit einer mittleren Leistungsdichte vor (siehe Abbildung 2.13). Bei der üblichen Einteilung der Brennelementschalen ergibt sich im äußeren Bereich der Brennstoffzone eine reduzierte Leistungsdichte. Zusätzlich erfordert die Abbildung einer realistischeren räumlichen Leistungsverteilung im Modell auch eine höhere radiale Auflösung des Brennelements.

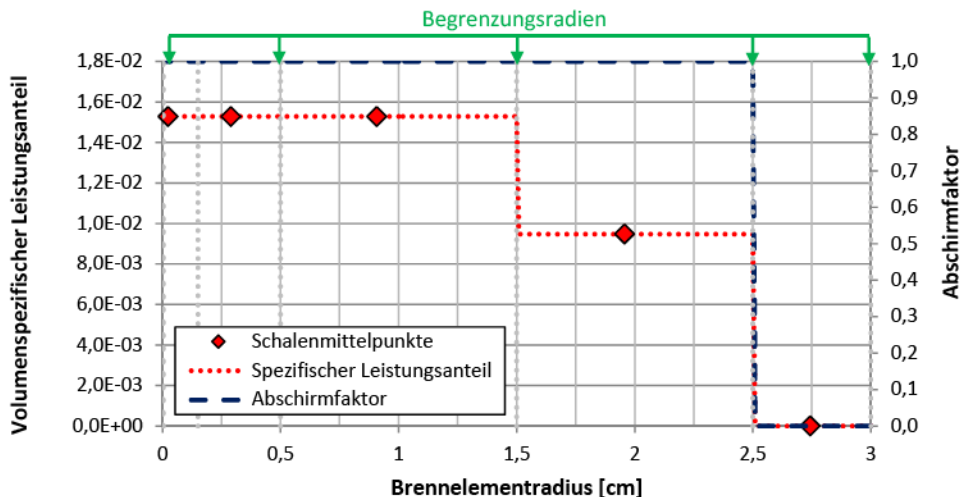


Abbildung 2.13: Abschirmfaktor und volumenspezifischer Anteil an der gesamten Leistung eines HTR-Modul-Brennelements bei einer üblichen Einteilung des Brennelements in VSOP

Da die Temperatur sowohl Zielgröße als auch Eingangsgröße für die Wärmeleitfähigkeit im Matrixgraphit ist, muss sie iterativ bestimmt werden. Durch ein Heranziehen der Temperatur im vorliegenden Berechnungsschritt kann die iterative Bestimmung des Temperaturprofils beschleunigt werden.

Da die Wärmeleitfähigkeit eine strukturabhängige Eigenschaft ist, wird ihr theoretisches Verständnis durch die beim Graphit recht komplizierten Strukturverhältnisse erschwert. Bei Reaktorgraphit kann die Struktur nicht als fest vorgegeben angesehen werden, weil unter dem Einfluss energiereicher Neutronen Veränderungen im Aufbau des Kristallgitters und der nicht kristallinen Bereiche, die zusätzlich noch stark von der Bestrahlungstemperatur abhängen eintreten [BIN1974]. Je nach Eingabe kann auch die Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von der schnellen Neutronenfluenz berücksichtigt werden. Die Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von den beiden Größen ist in Abbildung 2.14 dargestellt.

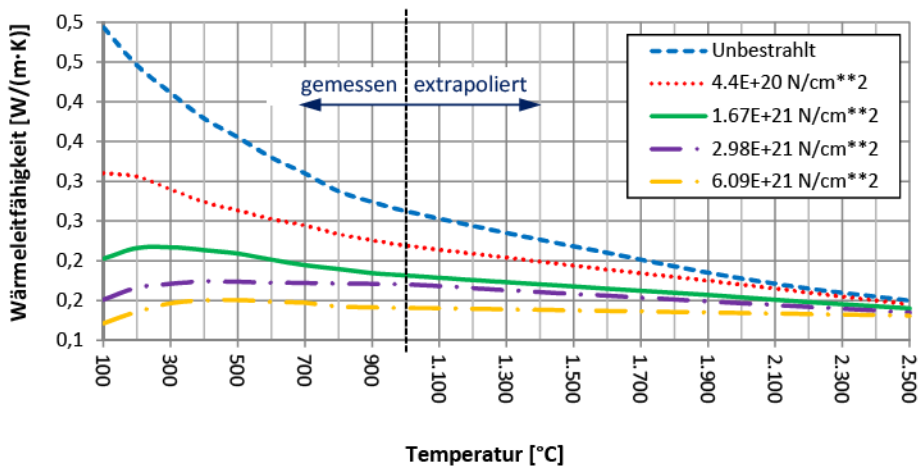


Abbildung 2.14: Wärmeleitfähigkeit vom A3-3-Matrixgraphit (NUKEM) in Abhängigkeit von der Temperatur und der schnellen Neutronenfluenz [RUE2012, BIN1974] (eigene Darstellung)

Durch die Bestrahlung mit schnellen Neutronen werden die Kohlenstoffatome aus dem Gitterverband herausgeschlagen und auf Zwischengitterplätze eingebaut, was bei Neutronenfluenzen über 10^{19} n/cm^2 ($E > 0,1 \text{ MeV}$) zu einer Verschlechterung der Wärmeleitfähigkeit führt [SIE1987]. Die Berücksichtigung der schnellen Neutronenfluenz führt zu einer größeren Spreizung der Brennelementtemperaturen.

Abbildung 2.15 zeigt den Einfluss der radialen Auflösung der Brennelementgeometrie auf das Temperaturprofil. Diese Abweichung ist bei konstanter räumlicher Leistungsverteilung von untergeordneter Bedeutung.

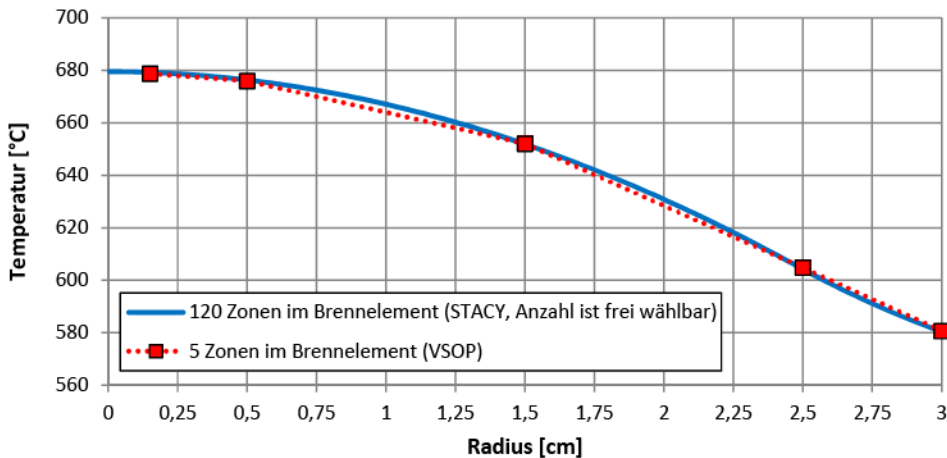


Abbildung 2.15: Temperaturverlauf innerhalb eines Kugelbrennelements des HTR-Modul

Einfluss auf die Spaltproduktfreisetzung

Die in diesem Abschnitt vorgestellte Berechnung des Temperaturprofils wird in STACY optional in der Spaltproduktfreisetzungsrechnung berücksichtigt. Im Normalbetrieb liegt aufgrund der nuklearen Leistung des Brennelements ein ausgeprägtes Temperaturprofil über dem Brennelement vor. Bei Störfällen, ausgenommen Reaktivitätsstörfälle, bei denen die Nachzerfallsleistung schnell abklingt, ist das Temperaturprofil innerhalb kurzer Zeit ausgeglichen, so dass dessen detaillierte Berechnung nicht erforderlich ist.

In den beiden Spaltproduktfreisetzungsprogrammen FRESKO-I und FRESKO-II wurde das Temperaturprofil über dem Brennelementradius vernachlässigt und davon ausgegangen, dass die Zentraltemperatur des Brennelements im gesamten Volumen vorliegt. Dies ist eine konservative Annahme, da so u. a. mit zu hohen Diffusionskoeffizienten gerechnet wird.

Bei der Rechnung ohne Berücksichtigung des Temperaturprofils wird als Randbedingung für die Berechnung der Freisetzung aus Graphitkörnern bzw. der aus Partikeln die mittlere Spaltproduktkonzentration auf den Korngrenzen ($\bar{c}_{SP,Matrix}$) genutzt (siehe Abbildung 2.16). Um diesen Wert zu erhalten wird das radiale Konzentrationsprofil in der Brennelementmatrix ($c_{SP,Matrix}(r)$) gemittelt. Die gemittelte Konzentration, die im nächsten Zeitschritt als Randbedingung für die Freisetzungsrechnung der Partikel und Graphitkörner angesetzt wird, ist demnach kleiner als die Konzentration, die im Zentrum des Brennelements vorliegt.

Die Spaltproduktfreisetzung aus den Graphitkörnern und Partikeln hängt von der Spaltproduktkonzentration auf den Korngrenzen ($c_{SP,Randb}$) ab. Der Spaltproduktquellterm bei der Diffusionsrechnung im Matrixgraphit wird durch die Freisetzungsrates aus den Körnern und Partikeln bestimmt (\dot{Q}_{SP}). Bei Berücksichtigung des Temperaturprofils wird für jede Brennelementschale eine mittlere Temperatur bestimmt und mit ihrer Hilfe eine Berechnung des Defektanteils sowie der Freisetzung aus den Graphitkörnern und den Partikeln in der betrachteten Schale durchgeführt. Nur das Partikel, das sich im Zentrum des Brennelements befindet, verhält sich näherungsweise wie das repräsentative Partikel in der Berechnung ohne Berücksichtigung des Temperaturprofils. Die anderen

Partikel und Graphitkörner werden mit einer niedrigeren Temperatur beaufschlagt, wodurch die Diffusionskoeffizienten sinken. Aber auch für das Graphitkorn und Partikel im Zentrum gilt in der Simulation eine andere Randbedingung. Es wird nicht mehr die mittlere Spaltproduktkonzentration auf den Korngrenzen in der Brennstoffzone genutzt, sondern die mittlere Konzentration auf den Korngrenzen in der innersten Schale. Diese mittlere Schalenkonzentration liegt deutlich über der der gesamten Brennstoffzone, wodurch die Spaltproduktfreisetzung bei sonst gleichen Größen weiter sinkt. Durch die verringerte Freisetzung aus den Partikeln und Körnern ist die Spaltproduktkonzentration auf den Korngrenzen niedriger (siehe Abbildung 2.17).

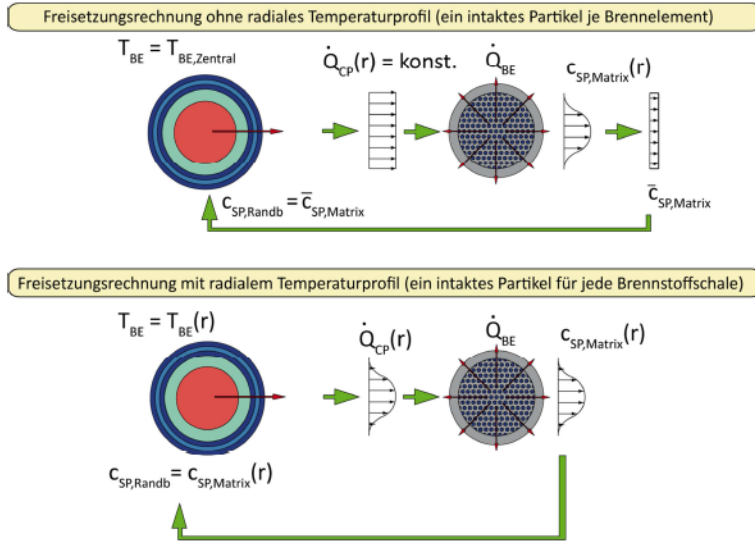


Abbildung 2.16: Vergleich der Datenflüsse in der Spaltproduktfreisetzungsrechnung bei Vernachlässigung sowie bei Berücksichtigung des Temperaturprofils über dem Brennstoffradius

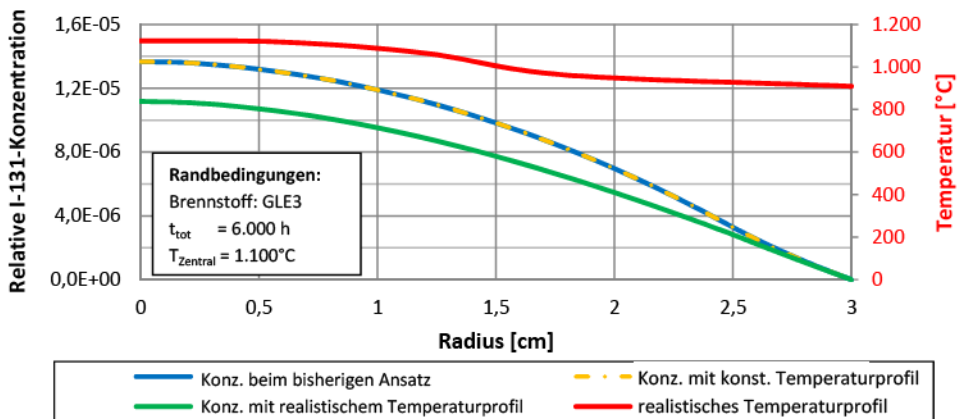


Abbildung 2.17: Einfluss der Berücksichtigung des radialen Temperaturprofils auf das I-131-Konzentrationsprofil in der Graphitmatrix

Die Berücksichtigung des radialen Temperaturprofils hat auf die Spaltproduktfreisetzung unter Normalbetriebsbedingungen einen Einfluss im einstelligen Prozentbereich. Die Freisetzung unter Störfallbedingungen wird nur am Anfang leicht durch die Berücksichtigung des Temperaturprofils unter Normalbedingungen beeinflusst. Nach einem deutlichen Anstieg der Brennelementtemperatur und der damit verbundenen Freisetzung aus den Partikeln ist der Einfluss eher gering.

2.5.3 Verwendung des realen Nuklidinventars

Bei den bisher verwendeten Programmen wurde eine starke Abstrahierung des Problems bei der Inventarabschätzung vorgenommen. Zunächst soll aufgezeigt werden, welche Annahmen getroffen wurden. Danach wird auf die Erweiterung des Programms eingegangen und ihr Einfluss auf die zeitliche Freisetzung eines Nuklids im Normalbetrieb dargestellt.

Für das Inventar eines Nuklids „i“ im Reaktor kann die folgende, allgemein gültige Differentialgleichung aufgestellt werden [GER1993]:

$$\begin{aligned} \frac{dN_i(t)}{dt} = & \int_0^\infty \sum_j \gamma_j(E) \cdot \sigma_{f,j}(E) \cdot N_j(t) \cdot \phi(E,t) dE \\ & + \int_0^\infty [\sigma_{c,i-1}(E) \cdot N_{i-1}(t)] \cdot \phi(E,t) dE + \sum_j \lambda_j \cdot N_j(t) \\ & + \int_0^\infty \sum_i \sigma_{a,i}(E) \cdot N_i(t) \cdot \phi(E,t) dE - \lambda_i \cdot N_i(t) \end{aligned} \quad 2.14$$

mit:	$\phi(E,t)$	- Energie- und zeitabhängiger Neutronenfluss	$[n/(m^2 \cdot s)]$
	γ	- Spaltproduktausbeute	
	λ	- Zerfallskonstante	$[1/s]$
	σ_a	- Absorptionsquerschnitt	$[barn]$
	σ_f	- Spaltquerschnitt	$[barn]$
	N	- Kernzahldichte	$[Atome/(barn \cdot cm)]$

Diese Gleichung wird auch Abbrandgleichung genannt. Der erste Term auf der rechten Seite der Gleichung beschreibt die Produktion des Nuklids durch Spaltung vom Nuklid „N₁“ mit der Spaltausbeute γ_i . Der zweite und vierte Term beschreiben die Entstehung aus Vorläufernukliden „i-1“ bzw. die Verlust des Isotops durch Neutroneneinfang. Der dritte und fünfte Term erfassen die Entstehung aus Vorläufernukliden bzw. Verlust des Isotops durch Zerfallsreaktionen. Für jedes Nuklid kann eine solche Gleichung aufgestellt werden. Die Lösung dieses Gleichungssystems beschreibt die zeitliche Entwicklung des Nuklidinventars. Das Gleichungssystem lässt sich nur in einfachen Fällen vollständig analytisch lösen. Für praxisnahe Anwendungen ist dies ausgeschlossen, stattdessen kommen numerische Methoden zum Einsatz [GER1993].

Eine Kopplung von FRESCO-II mit einem Abbrandcode war nicht vorhanden. Ausgehend von der allgemeingültigen Gleichung 2.14 wurde eine einfach lösbare Gleichung, die das Spaltproduktinventar unabhängig von den anderen Inventaren beschreibt, entwickelt. Die Energieabhängigkeit aller Terme wurde vernachlässigt. Stattdessen wurde angenommen, dass das betrachtete Nuklid nur durch Spaltung mit einer konstanten Entstehungsrate gebildet wird und durch Zerfall wieder vernichtet wird. Des Weiteren wurden relative Freisetzungsraten simuliert. Definitionsgemäß ist das

Inventar am Anfang des Normalbetriebs gleich 0 und am Anfang des Störfalls 100. Mit diesen Vereinfachungen lässt sich die mittlere Bildungsrate \dot{Q}_{Mittl} (mittlerer Quellterm) nach folgender Gleichung berechnen:

$$\dot{Q}_{\text{Mittl}} = \frac{\lambda}{1 - \exp(-\lambda \cdot t_B)} \quad 2.15$$

mit: t_B - Bestrahlungszeit / Betriebszeit [s]
 λ - Zerfallskonstante [1/s]

Damit ergibt sich das Spaltproduktinventar zu:

$$\text{Inv}_{\text{Sp}}(t) = \frac{1 - \exp(-\lambda \cdot t)}{1 - \exp(-\lambda \cdot t_B)} \quad 2.16$$

In der Realität werden alle Isotope (sowohl stabile als auch instabile) durch Spaltung direkt oder durch den sukzessiven radioaktiven Zerfall entlang von Spaltproduktketten gebildet. Für eine räumlich aufgelöste Simulation der Spaltproduktfreisetzung im Core ist eine genaue Betrachtung des Inventars erforderlich. Des Weiteren ist es bei einer Gesamtanlagenrechnung notwendig mit absoluten Brennelementinventaren zu rechnen, da verschiedene Abbrandzustände nebeneinander vorliegen.

Für einige Nuklide trifft eine Reihe der vorher beschriebenen Vereinfachungen zu. Vor allem für primäre Spaltprodukte stellt Gleichung 2.16 eine gute Näherung dar. Für andere Nuklide, deren Bildungsprozesse weitaus komplexer sind, z. B. Aktivierungsprodukte, liefert die Gleichung allerdings stark abweichende Ergebnisse. Dieses gilt für alle Nuklide mit metastabilen Zuständen, bei denen eine Reihe der dem einfachen Ansatz zugrundeliegenden Annahmen verletzt werden. Ein Beispiel ist das Isotop Silber-110m (Ag-110m). Es wird nur in geringsten Mengen als direktes Spaltprodukt gebildet. Die Hauptquelle ist die Bildung aus Ag-109 durch Neutroneneinfang.

In Abbildung 2.18 sind die mit dem Abbrandcode TNT und die mit der vereinfachten Gleichung berechneten relativen Inventare der Leitnuklide dargestellt. Dabei wurde ein HTR-typisches Neutronenflussprofil angenommen. Der relative Inventarverlauf von Sr-90 ist nahezu deckungsgleich mit dem von Cs-137 und ist demnach nicht dargestellt. Zu sehen ist, dass der Verlauf der Inventarkurve der langlebigen Spaltprodukte in erster Näherung grob mit dem Verlauf nach der analytischen Gleichung 2.16 übereinstimmt. Das kurzlebige Spaltprodukt I-131 weist dagegen einen ganz anderen Verlauf auf. Aufgrund des Neutronenflussmaximums in der Nähe der Coremitte baut sich das I-131-Inventar aufgrund der ansteigenden Bildungsrate bis zur Coremitte hin auf, während auf dem weiteren Weg durch das Core bei abnehmendem Neutronenfluss der Abbau durch Zerfall höher ist als der Aufbau. Im Gegensatz dazu würde mit dem FRESCO-II-Ansatz das Inventar kurzlebiger Nuklide sehr schnell bis zum Gleichgewichtsinventar ansteigen und konstant bleiben. Man sieht, dass die analytische Gleichung zur Berechnung des Inventars kurzlebiger Nuklide nicht geeignet ist. Die TNT-Rechnung zeigt, dass Ag-110m im Vergleich zu dem FRESCO-II-Ansatz langsamer gebildet wird.

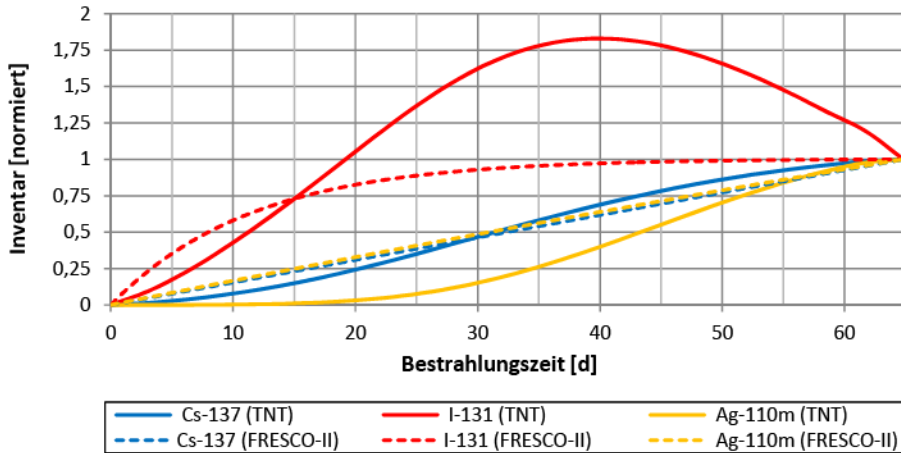


Abbildung 2.18: Relatives Inventar (bezogen auf Endinventar) während eines Durchlaufs durch das Core entlang der Mittelachse

Die Diffusionsgleichung (siehe Gleichung 1.6) benötigt allerdings nachwievor eine mittlere Bildungsrate, mit der das Spaltprodukt erzeugt wird. Zur Berücksichtigung eines realen, in der Eingabe vorgegebenen Inventarverlaufs wird die Gleichung 2.15 nicht mehr auf die komplette Betriebs- bzw. Bestrahlungszeit „ t_B “ angewandt, sondern Intervallweise. Dazu muss zuerst die Gleichung erneut hergeleitet werden, weil der Term, der das Anfangsinventar beinhaltet, beim Herleiten der Gleichung 2.15 gestrichen wurde. Der mittlere Quellterm im Zeitintervall „ i “ berechnet sich dann folgender Gleichung:

$$\dot{Q}_{\text{Mittl},i} = \frac{\lambda}{1 - \exp(-\lambda \cdot \Delta t_i)} \cdot (\text{Inv}_{i,\text{Ende}} - \text{Inv}_{i,\text{Anfang}} \cdot \exp(-\lambda \cdot \Delta t_i)) \quad [\text{mols/s}] \quad 2.17$$

mit:

Δt_i	- Länge des Intervalls „ i “	[s]
$\text{Inv}_{i,\text{Anfang}}$	- Inventar am Anfang des Zeitintervalls „ i “	[mol]
$\text{Inv}_{i,\text{Ende}}$	- Inventar am Ende des Zeitintervalls „ i “	[mol]

Die Gleichung berechnet somit eine mittlere Bildungsrate, mit der das Inventar ausgehend von „ $\text{Inv}_{i,\text{Anfang}}$ “ am Anfang des Intervalls auf „ $\text{Inv}_{i,\text{Ende}}$ “ am Ende ansteigt. Abbildung 2.18 zeigt beispielsweise das Ag-110m-Inventar während eines Core-Durchlaufs durch den HTR-Modul. Dabei dienen die Inventare einer Abbrandrechnung mit dem Programm TNT als Eingabe. Wie in Abschnitt 1.4.2 beschrieben, wird für ein intaktes Partikel, für verschiedene Defektpartikel, für ein repräsentatives Graphitkorn sowie für die Poren im Matrixgraphit je ein radiales Spaltproduktkonzentrationsprofil berechnet. Integriert man diese Konzentrationsprofile und addiert man anschließend die so berechneten Einzelinventare, dann ergibt sich das gesamte Spaltproduktinventar im Brennelement. Der zeitliche Inventarverlauf der STACY-Rechnung mit vorgegebener Inventarkurve ist in Abbildung 2.19 dargestellt (grüne Kurve). Wie die Abbildung zeigt, werden die mit TNT ermittelten Inventare durch die STACY-Rechnung gut getroffen. Die FRESCO-II-Rechnung, bei der nur das Inventar am Ende des Betrachtungszeitraums vorgegeben werden kann, weist hier einen stark abweichenden Verlauf auf.

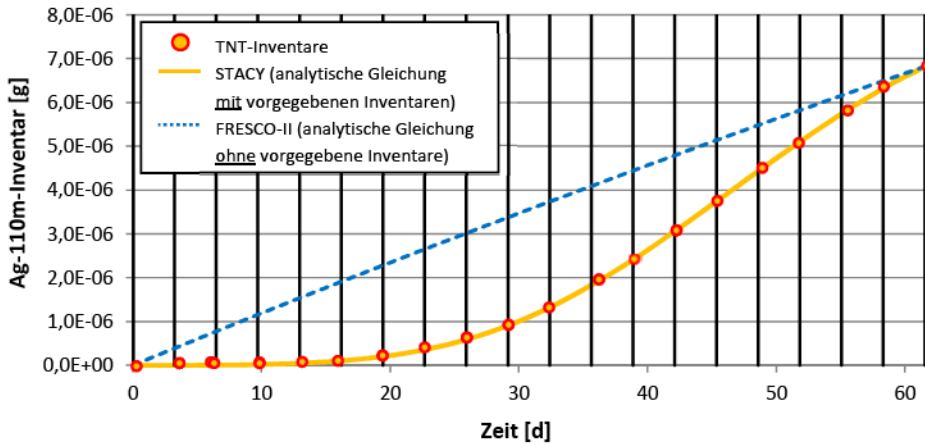


Abbildung 2.19: Gegenüberstellung des Ag-110m-Inventars eines HTR-Modul-Brennelements nach TNT, nach der analytischen Gleichung in FRESCO-II und nach der Gleichung unter Benutzung der TNT-Inventare für einen Coredurchlauf

Verteilung des Bildungsterms auf die einzelnen Diffusionskörper

Für die Diffusionsrechnung wird für jeden Zeitschritt eine Bildungsrate für das gesamte Brennelement nach Gleichung 2.17 benötigt. Hier geht der Nuklidvektor zu Beginn und Ende eines Rechenintervalls ein. Diese Rate sagt allerdings noch nichts darüber aus, wie und wo diese Nuklide im Brennelement entstehen. Aufgrund der Vielzahl möglicher Prozesse kann aus dem alleinigen Vergleich zweier Nuklidvektoren nicht gefolgert werden, welche Umwandlungen stattgefunden haben. Für die Zuordnung der Bildungsrate auf die einzelnen Diffusionskörper und zum Teil auf die einzelnen Schichten eines Diffusionskörpers wird dennoch ein Verteilungsschlüssel benötigt. Zur Bestimmung dieses Schlüssels werden daher zwei Annahmen getroffen werden. So wird vorausgesetzt, dass die Bildungsrate proportional zum Uraninventar ist. Beispielsweise beschränkt sich das Uraninventar in der brennstofffreien Zone auf die natürliche Uranverunreinigung und ist im Vergleich zum Uraninventar in der Brennstoffzone gering. Damit wird implizit angenommen, dass das betrachtete Nuklid lediglich durch Spaltungen entsteht. Des Weiteren wird die Annahme getroffen, dass das Uran immobil ist. Unter 1.500°C ist eine nennenswerte Uran-Diffusion praktisch auszuschließen [MUE1976]. Das Uran wird an jeder Stelle gleich umgewandelt, demnach bleibt die relative Anfangsverteilung des Urans für jeden Zeitpunkt gleich. Die Verteilung über den Brennstoffkern, die unterschiedlichen Beschichtungen, Graphitkörner und Poren wird vom Anwender vorgegeben. So berechnet sich die volumenspezifische Bildungsrate im Brennstoffpartikel nach folgender Gleichung:

$$\dot{Q}_{\text{CP-Kern}} = \frac{\dot{Q}_{\text{BE}} \cdot f_{\text{U-235}}}{V_{\text{CP-Kern}}} \quad 2.18$$

mit:	$\dot{Q}_{\text{CP-Kern}}$	- Bildungsrate im Partikelkern	[mol/(m ³ ·s)]
	\dot{Q}_{BE}	- integrale Bildungsrate für ein Brennelement	[mol/s]
	$f_{\text{U-235}}$	- U-235-Anteil im Partikelkern bezogen auf die Gesamtmenge im Brennelement	
	$V_{\text{CP-Kern}}$	- Volumen des Partikelkerns	[m ³]

Laut Gleichung 2.18 wird die integrale Bildungsrate volumengewichtet über die Einzelmaterialien aufgeteilt. In einem allgemeingültigen Modell, das für alle freisetzungsrelevanten Nuklide gültig ist, sollten parallel Diffusionsrechnungen für die Vorläufernuklide des betrachteten Nuklids als auch für das Nuklid selbst durchgeführt werden. Die Diffusionskoeffizienten dieser Vorläufernuklide sind allerdings meistens unbekannt. Damit ist eine solch detaillierte Betrachtung in der Regel nicht möglich. Anstelle einer mittleren Bildungsrate, die aus einem Ausschnitt des Nuklidvektors berechnet wird, sollen die Bildungsraten vom Abbrandcode transferiert werden, damit die Einzelbeiträge aus den verschiedenen nuklearen Prozessen bei der lokalen Berechnung der Bildungsrate herangezogen werden können. Bei dieser Betrachtungsweise berechnet sich die Bildungsrate im Partikelkern nach folgender Gleichung:

$$\dot{Q}_{\text{Kern}}^{k+1} = \sum_i^n f_{i \rightarrow \text{Nuklid}}^{k+1} \cdot \text{Inv}_i^k \quad 2.19$$

mit: $f_{i \rightarrow \text{Nuklid}}$ - Übergangsrate von einem Vorläufernuklid zu dem betrachteten Nuklid [1/s]
 Inv_i - Inventar des Vorläufernuklids im Partikelkern zu Beginn des Zeitschritts [mol]
 $k, k+1$ - Zeitschritte

Obwohl diese Annahme streng genommen nur auf Spaltprodukte zutrifft, wird in [FRI1976] gezeigt, dass der Einfluss von Vorläufernukliden auf die Freisetzungsraten maßgeblich am Anfang der Lebensdauer beschränkt ist. Durch die Berücksichtigung des Phänomens bei der Betrachtung eines einzigen Brennelements könnte die Freisetzungsraten bei durch Neutroneneinfang produzierten Nukliden, wie z. B. Cs-134, am Anfang geringfügig höher ausfallen. Bei der Simulation eines kompletten Cores könnte dies zu einer kleineren räumlichen Verschiebung der Freisetzungsraten führen. Das Freisetzungsverhalten ist für verschiedene Isotope eines Elements demnach unterschiedlich. Diffusionskoeffizienten werden allgemein für verschiedene Isotope eines Elements gleich angesetzt. Trotz dieses Sachverhaltes wurden in der Vergangenheit Differenzen bei den relativen Freisetzungsraten von Cs-134 und Cs-137 festgestellt. Obwohl das Diffusionsverhalten als gleich vorausgesetzt wird, haben beide Isotope andere Vorläufernuklide, die diesen Unterschied erklären könnten [FRI1976]. Diese Betrachtungsweise ist allerdings mit einem erheblichen Rechenzeitaufwand verbunden, und bei der jetzigen Ankopplung des Abbrandcodes müssten große Datenmengen mittels I/O-Kopplung übertragen werden.

Einfluss der Abbrandrechnung auf die Spaltproduktfreisetzungsrechnung im Normalbetrieb

Im Rahmen dieser Arbeit ist vor allem die Auswirkung des Inventaraufbaus auf die Freisetzungsraten von Interesse. In Abbildung 2.20 ist das Verhältnis der relativen Freisetzungsraten von Sr-90 bezogen auf die Freisetzungsraten am Ende der Lebensdauer sowohl mit konstantem als auch variablem Quellterm dargestellt. Aufgrund der langen Halbwertszeit baut sich das Inventar nach der vereinfachten Gleichung linear auf. Laut Abbrandrechnung baut sich das Inventar am Anfang schneller auf als nach der vereinfachten Gleichung, dafür ist die Inventarzunahme danach geringer.

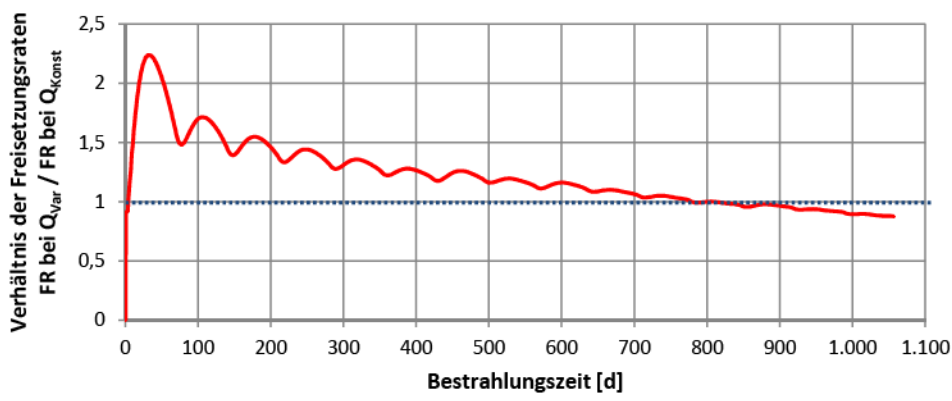


Abbildung 2.20: Verhältnis der Sr-90-Freisetzungsraten mit variabler Quelle zu derjenigen mit konstanter Quelle über die Brennelementlebensdauer am Beispiel eines HTR-PM-Brennelements

Dies liegt daran, dass die Freisetzungsraten unter Berücksichtigung des Abbrands am Anfang der Lebensdauer höher sind. In dem Beispiel in Abbildung 2.20 sind die berechneten Freisetzungsraten erst bei etwa 800 Stunden gleich. Danach ist die Freisetzungsraten, die mit Hilfe der vereinfachten Formel bestimmt wurde, im Vergleich zur Freisetzungsraten unter Berücksichtigung der Abbrandrechnung geringer.

Zur Beurteilung des Einflusses wird die zeitlich gemittelte Freisetzungsraten herangezogen, die sich nach folgender Gleichung berechnet:

$$FR_{Mittel} = \frac{\int_{t=0}^{t_B} FR(t) \cdot dt}{t_B}$$

2.20

mit: FR

- Freisetzungsraten

[mol/s]

t_B

- Bestrahlungszeit

[s]

Am Beispiel von Sr-90 kann festgehalten werden, dass die zeitlich gemittelte Freisetzungsraten mit der Annahme einer konstanten Bildungsrate bei langlebigen Nukliden um etwa 10 unterschätzt wird (siehe Tabelle 2.3).

Tabelle 2.3: Zeitlich gemittelte Sr-90-Freisetzungsraten eines beliebigen Brennelements des HTR-PM

Zeitlich gemittelte Freisetzungsraten	
[mol/s]	
mit variabler Bildungsrate	9,25 · 10 ⁻¹⁸
mit konstanter Bildungsrate	8,30 · 10 ⁻¹⁸
Differenz	+10,3

Bei langlebigen Nukliden weicht der Verlauf des Inventars bei Anwendung der vereinfachten Gleichung nur unbedeutend von dem mit Hilfe eines Abbrandcodes bestimmten Verlaufs ab. Damit wird bei anderen langlebigen Nukliden die mittlere Freisetzungsrates eine ähnliche Diskrepanz aufweisen.

Die zeitliche Entwicklung des I-131-Inventars weist aufgrund der kurzen Halbwertszeit von 8,02 Tagen einen anderen Verlauf als Sr-90 auf. Durch die Kurzlebigkeit wird die Gleichgewichtskonzentration unter konstanten Randbedingungen schnell erreicht. Bei der vereinfachten Gleichung 2.16 werden konstante Bedingungen angenommen. Das entsprechende I-131-Inventar ist in Abbildung 2.21 (blau) dargestellt, wobei das Inventar am Ende der Bestrahlungszeit zu 100 gesetzt wurde. Im Falle einer MEDUL-Brennstoffstrategie variiert der Neutronenfluss über die Zeit. Dies resultiert darin, dass zu Zeiten eines hohen Neutronenflusses ein Inventarzuwachs zu verzeichnen ist. In Abbildung 2.21 ist der Inventaraufbau bei konstanter und variabler Bildungsrate für 15 Zyklen dargestellt. Das Maximum des I-131-Inventars wird bei jedem Durchlauf in etwa auf halber Corehöhe erreicht.

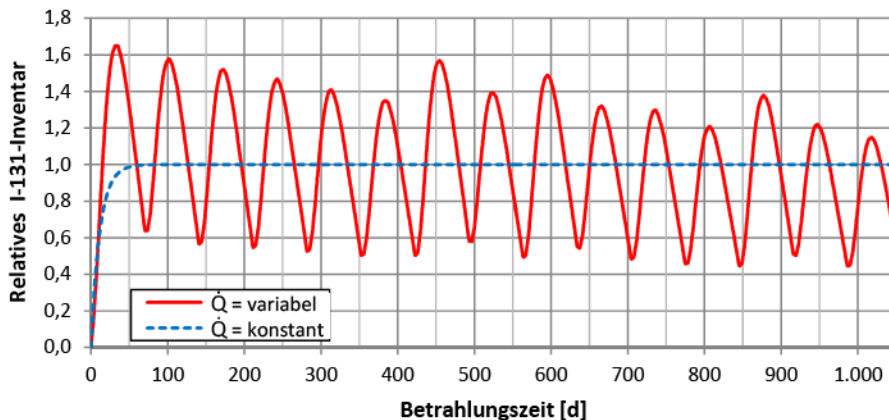


Abbildung 2.21: Vergleich des relativen I-131-Inventars bei einer konstanten und variablen Bildungsrate in der Spaltprodukt-diffusionsrechnung eines beliebigen Brennelements (HTR-PM, 15 Durchläufe)

In Bereichen mit geringem Neutronenfluss übersteigt die Zerfallsrate die Aufbaurates, daher nimmt das Inventar ab. Aufgrund des Mehrfachdurchlaufs weist das Inventar einen zyklischen Verlauf auf. Um eine Vergleichbarkeit mit dem analytischen Ansatz zu ermöglichen, wurde der Verlauf so normiert, dass das zeitliche Durchschnittsinventar gleich 100 ist.

Die Auswirkung auf die I-131-Freisetzungsrechnung ist in Abbildung 2.22 exemplarisch für ein beliebiges Brennelement des HTR-PM dargestellt. Nur die ersten 7 Durchläufe von insgesamt 15 sind gezeigt. Aufgrund der Tatsache, dass ein Kugelbrennelement an verschiedenen Radien durch das Core fließt, wird je nach radialer Anfangsposition eine andere Maximaltemperatur und anderer Neutronenfluss aufgeprägt. Dies resultiert in unterschiedlichen Maxima der Freisetzungsrates.

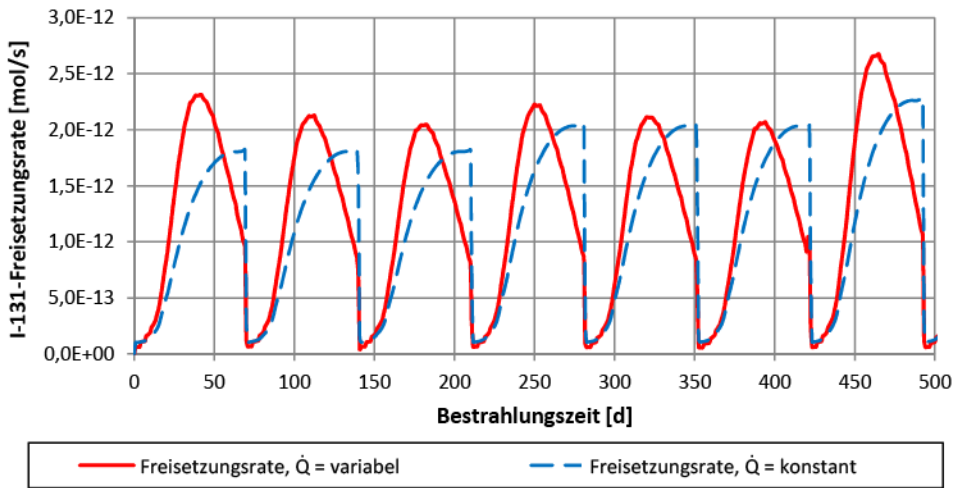


Abbildung 2.22: Vergleich der I-131-Freisetzung bei einer konstanten und variablen Bildungsrate in der Spaltproduktbildungsrechnung (HTR-PM, die ersten 7 von insgesamt 15 Durchläufen)

Wie Abbildung 2.21 zeigt, wird das Gleichgewichtsinventar bei der Simulation mit konstanter Bildungsrate kurz vor Ende des ersten Durchlaufs erreicht, so dass das Inventar in allen nachfolgenden Durchläufen konstant bleibt. Die Brennelementtemperatur nimmt während eines Durchlaufs durch das Core von oben nach unten zu. Aufgrund der Tatsache, dass die Freisetzungsrates bei konstantem Inventar hauptsächlich eine Funktion der Brennelementtemperatur ist, weist die Freisetzungsrates einen ähnlichen Verlauf auf, wobei die maximale Freisetzungsrates im unteren Corebereich erreicht wird. Im Gegensatz dazu wird die maximale Freisetzungsrates bei variabler Bildungsrate je nach Temperatur- und Inventarverlauf auf einer anderen Höhe im Core erreicht. Unabhängig davon liegt das Maximum für einige Durchläufe allerdings deutlich höher als bei der Rechnung mit konstanter Bildungsrate.

Einfluss der Abbrandrechnung auf die Spaltproduktinventare im Störfall

Wie vorher beschrieben unterscheidet sich der mit TNT berechnete Inventarverlauf, insbesondere der Verlauf kurzlebiger Nuklide, deutlich vom Ansatz in FRESCO-II. Somit weicht auch das Inventar eines Brennelements zu Störfallbeginn teilweise ab. Des Weiteren ändern sich die Nuklidinventare nicht nur im Normalbetrieb, sondern aufgrund verschiedener Zerfallsprozesse auch während des Störfalls. In FRESCO-II werden die Bildungsrates in der Spaltproduktfreisetzungsrechnung zu Beginn des Störfalls zu null gesetzt. In diesem Abschnitt wird daher untersucht, ob sich die Nuklidinventare seit Störfallbeginn noch bedeutend ändern. Dies könnte einen Effekt auf die Freisetzung der Spaltprodukte haben.

Dazu werden im Folgenden drei Rechenfälle unterschieden. Der erste Fall betrachtet sowohl die Bildung als auch den Abbau des Nuklids mit TNT. Der zweite Fall berücksichtigt nur den Zerfall. Beim dritten Fall wird die Zerfallskonstante in der genannten Gleichung so angepasst, dass die mit TNT berechneten Inventare bestmöglich getroffen werden. Die Abbildung 2.23 zeigt, dass die Vernachlässigung des I-131-Aufbaus zu einer Unterschätzung dieses Inventars von einigen Prozent führt. Bei alleiniger Berücksichtigung des Zerfalls würde dies durch eine Verringerung der

Zerfallskonstante von $1,0 \cdot 10^{-6}$ auf $9,2 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ kompensiert. Durch Annahme einer effektiven Zerfallskonstante in der Spaltproduktbildungsrechnung ist es möglich, die Abbrandrechnung auf den Normalbetrieb zu beschränken und im Störfall vereinfachend die Bildungsrate zu vernachlässigen und mit einer effektiven Zerfallskonstante zu rechnen (siehe Abbildung 2.23).

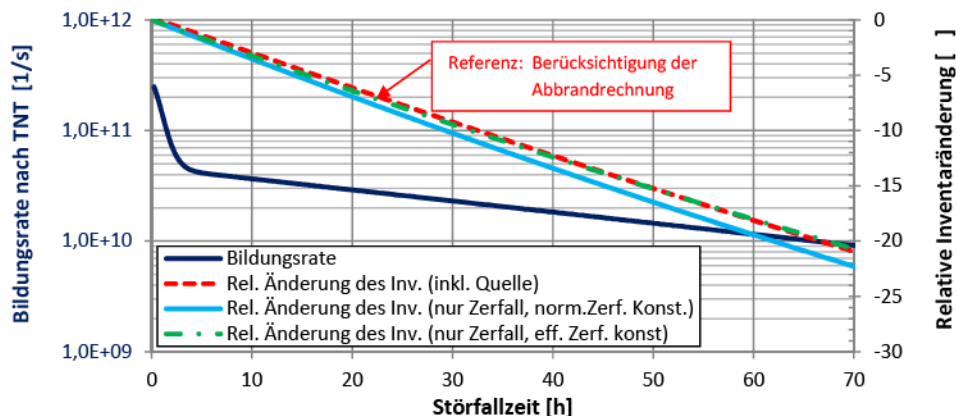


Abbildung 2.23: Bildungsrate von I-131 und relative Inventaränderung im Störfall für ein Brennelement des HTR-Modul

Dagegen ist das Verhalten der langlebigen Nuklide Cs-137 (siehe Abbildung 2.24) und Sr-90 (nicht dargestellt) anders. Eine detaillierte Analyse der Prozesse, die zu der Bildung von Cs-137 beitragen, ist in Anhang 5 dargestellt. Die Bildungsrate nimmt schnell um viele Zehnerpotenzen ab, bevor eine geringe stationäre Bildungsrate unter Störfallbedingungen erreicht wird. Daher spielt der Zuwachs bei diesen Nukliden nur eine kleinere Rolle, so dass die Bildungsrate sogar ohne Änderung der Zerfallskonstante vernachlässigt werden kann. Die Berücksichtigung der Abbrandrechnung im Störfall hat somit nur einen sehr kleinen Effekt auf die Inventaränderung im Störfall, der auch durch eine Verringerung der Zerfallskonstante (effektive Zerfallskonstante) berücksichtigt werden kann.

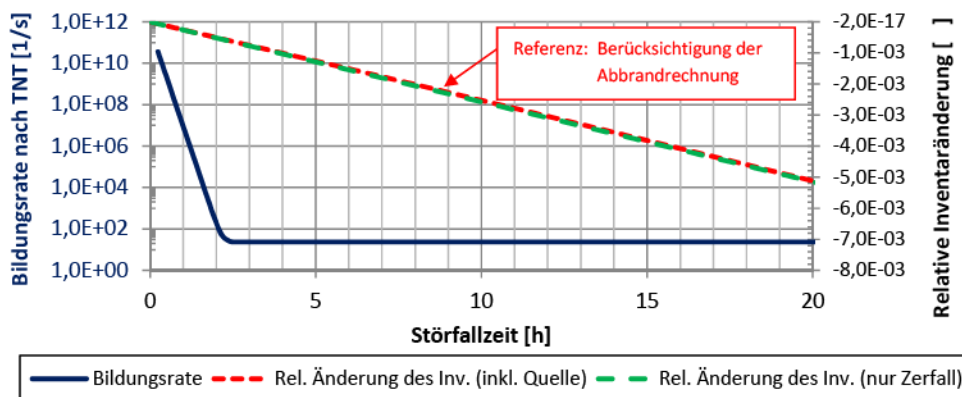


Abbildung 2.24: Bildungsrate von Cs-137 und relative Inventaränderung im Störfall für ein Brennelement des HTR-Modul

Einfluss der Abbrandrechnung auf die Berechnung des Partikelbruchanteils

In der Berechnung des Partikelbruchanteils wird eine zeitlich unabhängige Gesamtausbeute für alle gasförmigen Nuklide angenommen. Dabei ist das Gasinventar im Partikel lediglich eine Funktion des Abbrands. Eine solche Vereinfachung wird nicht nur beim Inventar vorgenommen, sondern auch beim Abbrand. In den früheren Programmen ist der Abbrand lediglich eine lineare Funktion der Zeit. Durch die Kopplung des Freisetzungsmoduls mit dem Abbrandcode TNT kann die Tatsache berücksichtigt werden, dass der Abbrand einer frischen Brennelementkugel zunächst stärker ansteigt und die Abbrandzunahme gegen Ende ihrer Lebensdauer abflacht. Simulationen haben gezeigt, dass eine genauere Betrachtung nur einen kleinen Einfluss auf die zeitliche Entwicklung des Partikelbruchanteils hat.

Durch eine Erweiterung der Datenbibliothek um die Temperaturen, bei der sich der Aggregatzustand ändert, könnte zukünftig die Menge an gasförmigen Spaltprodukten on-line bestimmt werden und die derzeit verwendete Annahme einer konstanten Ausbeute an gasförmigen Spaltprodukten ersetzen.

Insgesamt hat die Einbeziehung der Abbrandrechnung in der Freisetzungsrechnung einen großen Einfluss auf den zeitlichen Verlauf der freigesetzten Menge kurzlebiger Nuklide im Normalbetrieb. Durch die korrekte Abbrandrechnung wird der zeitliche Verlauf des Neutronenflusses mit einbezogen, wodurch der periodische Inventarverlauf von kurzlebigen Nukliden korrekt beschrieben wird. Hierdurch verlagert sich sowohl der Zeitpunkt, an dem das Maximum der Freisetzungsrates während eines Brennelementdurchlaufs auftritt, als auch die maximale Freisetzungsrates selber. Im Störfall kann eine dezidierte Abbrandrechnung vernachlässigt werden.

2.5.4 Einbeziehung realer Schichtdickenverteilungen in die Bruchanteilrechnung

In diesem Abschnitt wird untersucht, ob eine Berücksichtigung der produktionsbedingten Schichtdickenverteilung in der Berechnung der Partikelbruchanteile einen wesentlichen Einfluss auf das Ergebnis hat. Dazu werden zuerst die Brennstoffspezifikationen des HTR-Modul vorgestellt und mit anderen Spezifikationen verglichen. Anschließend wird geprüft, ob die Schichtdickenverteilungen miteinander korreliert sind. Abschließend wird geprüft, ob die Berücksichtigung der Schichtdicken einen Einfluss auf die berechneten Partikelbruchanteile hat.

Aufgrund der großen Produktionsmengen beschichteter Partikeln, die für den Reaktorbetrieb hergestellt werden, ist es nicht möglich, jedes einzelne Partikel auf Einhaltung der Spezifikationen zu überprüfen. In Tabelle 2.4 sind die Anforderungen bezüglich der Schichtdicken zusammengetragen, wie sie von NUKEM definiert wurden [IAE2012]. Tabelle 2.4 zeigt die Unterschiede zweier aktueller Brennstoffkonzepte. Bei dem HTTR-Design ist der Partikelkernradius größer und die Pufferschichtdicke im Vergleich zu den Partikeln im deutschen Referenzbrennelement deutlich kleiner dimensioniert.

Generell können die Brennstoffanforderungen in einem mehrachsigen Diagramm aufgetragen werden (siehe Abbildung 2.25). Hier sind die Anforderungen an den japanischen und deutschen Brennstoff denjenigen Anforderungen, wie sie im Rahmen des US amerikanischen Next Generation Nuclear Plant-Projektes (NGNP) definiert sind, gegenübergestellt. Die zulässige Standardabweichung der Pufferschichtdicke ist bei den HTTR-Partikeln aufgrund der im Vergleich zum deutschen Referenzbrennstoffdesign geringeren nominellen Pufferschichtdicke geringer.

Tabelle 2.4: Nennmaße des Brennstoffkerns und der verschiedenen Schichten sowie deren zulässige Abweichungen bei Brennelementen des HTR-Modul und des HTTR [IAEA2012, VER2001]

	HTR-Modul		HTTR	
	Nennmaß	Standard-abweichung	Nennmaß	Standard-abweichung
	[μm]	[μm]	[μm]	[μm]
Partikelradius	250	10	300	6
Pufferschichtdicke	95	18	60	12
innere PyC-Schichtdicke	40	10	30	6
Siliziumkarbidsschichtdicke	35	4	25	+2,5 / 0
äußere PyC-Schichtdicke	40	10	45	6

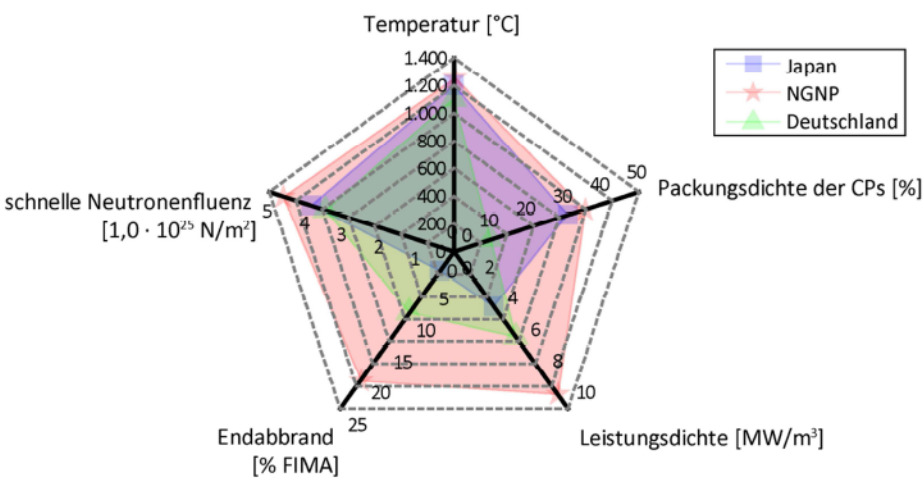


Abbildung 2.25: Zielvorstellungen für verschiedene TRISO-Brennstoffe [PET2012] (eigene Darstellung)

Bisher wurden in den Simulationen nur die Nenngrößen zur Berechnung der Bruchanteile benutzt. Falls ungünstige Parameter zusammentreffen, wie z. B. ein großer Partikelkern mit einem minimalem Puffer und einer minimalen Dicke der Siliziumkarbidsschicht, ist der Partikelbruchanteil deutlich höher als bei einem Partikel mit Nenngrößen. Aufgrund des nicht linearen Verhaltens und der Wechselwirkung der einzelnen Parameter wird untersucht, ob die Berücksichtigung der einzelnen Verteilungen einen Einfluss auf den berechneten Bruchanteil hat. Bei einer Berücksichtigung der Schichtdickenverteilungen in der Berechnung der Partikelbruchanteile müssen Partikel mit unterschiedlichen Schichtdicken betrachtet werden. Die Einzelergebnisse werden anschließend mit der jeweiligen Häufigkeit, mit der ein solches Partikel auftritt, gewichtet, um so in einem Partikelbruchanteil unter Berücksichtigung der Schichtdickenverteilungen zu resultieren. Zur Bestimmung der Häufigkeiten dieser Partikel werden die einzelnen Schichtdickenverteilungen benötigt, und es soll geprüft werden, ob die Verteilungen miteinander korreliert sind.

Am Oak Ridge National Laboratory (ORNL) wurden die Durchmesser der Brennstoffpartikel und die Dicken der einzelnen Beschichtungen von 186 in Deutschland gefertigten TRISO-Partikeln gemessen [HUN2012]. In Abbildung 2.26 sind die Brennstoffpartikeldurchmesser und die Pufferschichtdicken dargestellt.

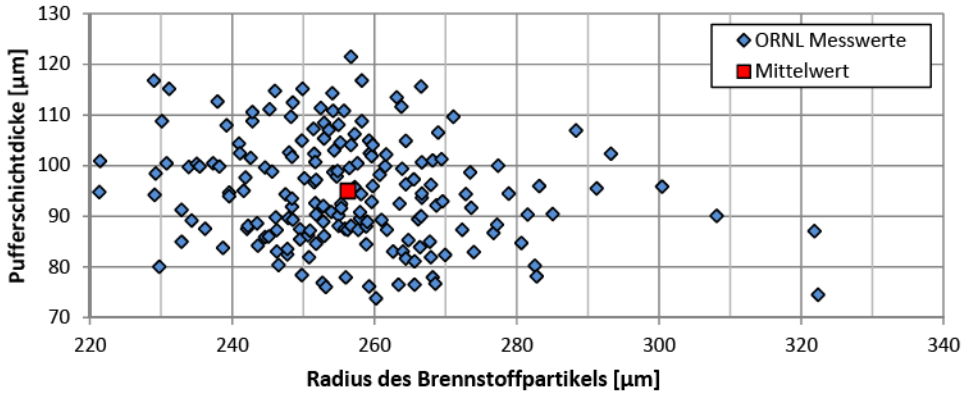


Abbildung 2.26: Gemessener Kerndurchmesser und gemessene Pufferschichtdicken von 186 vermessenen TRISO-Partikeln (Eingangsdaten [HUN2012], eigene Darstellung)

Bis auf einige wenige Partikel mit einem vergleichsweise großen Partikeldurchmesser weist die Darstellung nicht auf eine gegenseitige Abhängigkeit der beiden Größen hin. Die Verteilung der einzelnen Schichtdicken ist in Tabelle 2.5 dargestellt.

Tabelle 2.5: Erwartungswert und Standardabweichung des Brennstoffpartikeldurchmessers und der Pufferschichtdicke (Eingangsmessdaten: [HUN2012])

	Erwartungswert μ [μm]	Standardabweichung σ [μm]
Radius Partikelkern	256,26	8,23
Pufferschichtdicke	94,01	10,58
innere PyC-Schichtdichte	39,47	2,58
SiC-Schichtdichte	33,87	1,44
äußere PyC-Schichtdichte	36,18	1,96

Zur Untersuchung der gegenseitigen Abhängigkeit gibt es in der Statistik verschiedene Kennzahlen, die auf die hier untersuchte Problemstellung angewandt werden können. Die Kovarianz ist eine nicht standardisierte Maßzahl für den (linearen) Zusammenhang zweier Zufallsvariablen mit gemeinsamer Verteilung. Sie berechnet sich nach folgender Gleichung [ARE2009]:

$$\text{Cov}(X_1, X_2) = \frac{\sum_i^{n_{\text{CPs}}} (X_1(i) - \mu_1) \cdot (X_2(i) - \mu_2)}{n_{\text{CPs}}} \quad 2.21$$

mit: X_1, X_2 - gemessene Dicken zweier Schichtdicken [μm]
 μ_1, μ_2 - Erwartungswert beider Schichtdicken [μm]
 n_{CPs} - Anzahl der gemessenen Partikel

Die Höhe der Kovarianz hängt von der Anzahl der Messwerte ab. Der Korrelationskoeffizient, der nicht von der Anzahl der Messwerte abhängt, berechnet sich nach folgendem Ansatz [ARE2009]:

$$\text{Corr}(X_1, X_2) = \frac{\text{Cov}(X_1, X_2)}{\sqrt{\sigma_1} \cdot \sqrt{\sigma_2}} \quad 2.22$$

mit: σ_1, σ_2 - Standardabweichung beider betrachteter Schichtdicken $[\mu\text{m}]$

Der empirische Korrelationskoeffizient für die Kombination Partikelkerndurchmesser und Pufferschichtdicke beträgt 0,36. Die Zahl weist darauf hin, dass bei einem größeren Partikelkern, statistisch gesehen häufiger, eine dünnere Pufferschicht vorliegt. Die Abhängigkeit ist als schwach einzustufen. Die berechneten Korrelationskoeffizienten für die anderen Schichtkombinationen sind kleiner, d. h. die Abhängigkeit der Schichtdicken untereinander ist noch schwächer (siehe Tabelle 2.6).

Tabelle 2.6: Korrelationskoeffizienten für Schichtkombinationen, Messdaten: [HUN2012]

	Partikelkern	Puffer	IPyC	SiC	OPyC
Partikelkern	x	-0,36	-0,20	-0,17	-0,30
Puffer	-0,36	x	-0,07	-0,15	-0,11
IPyC	-0,20	-0,07	x	0,02	0,29
SiC	-0,17	-0,15	0,02	x	0,12
OPyC	-0,30	-0,11	0,29	0,12	x

Auffällig ist, dass der Korrelationskoeffizient zwischen der inneren bzw. äußeren Pyrokohlenstoffschicht mit den anderen Schichten unterschiedlich ist. Vermutlich liegt dies daran, dass bei der Herstellung der Partikel das Ablagerungsverhalten der PyC-Schicht auf die vorherige Schicht aufgrund des unterschiedlichen Materials des Untergrunds für die innere und äußere Pyrokohlenstoffschicht anders ist.

Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Analysen zeigen, dass die Schichtdicken normalverteilt sind. Falls die Schichtdickenverteilungen tatsächlich voneinander unabhängig sind, dann sollte die berechnete Partikeldurchmesserverteilung, die sich durch Addition der einzelnen Schichtdickenverteilungen ergibt, mit der gemessenen Verteilung weitestgehend übereinstimmen. Bei einer Addition „n“ verschiedener Normalverteilungen ergibt sich eine Normalverteilung, bei der der Erwartungswert der Summe der Erwartungswerte der einzelnen Normalverteilungen entspricht [ARE2009]:

$$\mu_{\text{ges}} = \sum_i^n \mu_i \quad 2.23$$

Die Standardabweichung der resultierenden Normalverteilung berechnet sich nach folgender Gleichung [ARE2009]:

$$\sigma_{\text{ges}} = \sqrt{\sum_i^n \sigma_i^2} \quad 2.24$$

Tabelle 2.7 zeigt, dass sich bei einer Addition der Einzelschichtdickenverteilungen eine etwas andere Verteilung im Vergleich zu der gemessenen Verteilung der Partikeldurchmesser ergibt. Die Standardabweichung ist bei der gemessenen Verteilung kleiner bei identischem Erwartungswert. Das bedeutet, dass eine abweichende Schichtdicke durch andere Schichten zum Teil kompensiert wird, wodurch die Verteilung geschmälert wird (siehe Anhang 6).

Tabelle 2.7: Erwartungswert und Standardabweichung des Partikeldurchmessers, Eingangsmessdaten: [HUN2012]

	Erwartungswert [μm]	Standardabweichung [μm]
aus gemessenen Einzelverteilungen berechnet	460,7	13,97
gemessene Verteilung	460,7	9,959

In der Rechnung wurde vereinfachend davon ausgegangen, dass die unterschiedlichen Verteilungen nicht miteinander korreliert sind und die Schichtdicken demnach unabhängig voneinander bestimmt werden können. Sowohl ein probabilistischer Ansatz (Monte-Carlo-Simulation) als auch ein deterministischer Ansatz werden betrachtet.

Bei der Monte-Carlo-Simulation wird für eine große Partikelanzahl und für jede Schicht per Zufallsgenerator eine Schichtdicke bestimmt. Da die Schichtdicken nicht miteinander korreliert sind, kann jede Schichtdicke unabhängig von den anderen bestimmt werden. Der Zufallsgenerator liefert eine pseudozufällige Folge von Zahlen, bei der der Anfangswert vorgegeben werden muss. Die so generierte Zahlenfolge muss in eine Zahlenfolge überführt werden, die einer Normalverteilung entspricht. Dies erfolgt durch die Invertierung der Normalverteilung auf numerischem Wege, da keine analytische Lösung für diesen Fall vorliegt. Die Bruchanteilberechnung mit dem Monte-Carlo-Ansatz ermöglicht eine gleichzeitige Berücksichtigung der Verteilungen aller Schichtdicken bei vertretbarem Rechenaufwand.

Im Vergleich dazu wurde eine deterministische Rechnung durchgeführt, bei der die Verteilung jeder Schicht in „n_{Klasse}“ diskrete Klassen unterteilt wird. Für jede Kombination wird eine individuelle Bruchanteilberechnung durchgeführt, wobei die Nennabmaße der Klasse in die Berechnung eingesetzt werden. Bei zwei normalverteilten Schichtdicken berechnet sich die Häufigkeit $h_{i,j}$ einer Klasse [ARE2009]:

$$h_{i,j} = \frac{10^6 \cdot \Delta t_i \cdot \Delta t_j}{2\pi \cdot \sigma_i \cdot \sigma_j} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \left[\frac{t_i - \mu_i}{\sigma_i}\right]^2\right) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \left[\frac{t_j - \mu_j}{\sigma_j}\right]^2\right) \quad 2.25$$

mit: $\Delta t_i, \Delta t_j$ - Breite beider Schichtdickenklassen [μm]
 t_i, t_j - Nennmaß beider Schichtdickenklassen [μm]
 σ_i, σ_j - Standardabweichung beider Schichtdickenklassen [μm]

Die Bruchanteile werden am Ende mit den entsprechenden Häufigkeiten gewichtet. Der Partikelbruchanteil unter Berücksichtigung der Verteilung beider Schichtdicken ϕ_{ges} ² berechnet sich somit nach folgender Gleichung:

$$\phi_{\text{ges}} = \int_{i=1}^{n_{\text{Klasse},1}} \int_{j=1}^{n_{\text{Klasse},2}} h_{i,j} \cdot \phi_{i,j} \quad 2.26$$

mit: $n_{\text{Klasse},1}$ - Anzahl der Klassen in, die die Schichtdickenverteilungen
 $n_{\text{Klasse},2}$ der beiden Schichten unterteilt werden
 $\phi_{i,j}$ - Partikelbruchanteil in der Klasse mit Nennmaß t_i und t_j

Die Häufigkeitsverteilung ist exemplarisch für die Pufferschichtdicke und den Partikelkerndurchmesser in Abbildung 2.27 dargestellt. Die Häufigkeiten der Partikelbruchanteile innerhalb der Klassen und die Beiträge zum gesamten Partikelbruchanteil sind für die Rechnung, bei der die Verteilungen des Partikelkerndurchmessers, SiC-Schichtdicke und der Pufferschichtdicke berücksichtigt werden, sind in Anhang 7 und 8 dargestellt.

Falls die Schichtdickenverteilung auf diese Weise bei mehreren Schichten berücksichtigt wird, ergeben sich viele mögliche Kombinationen, wodurch das Verfahren rechenintensiv ist. Eigene Rechnungen haben gezeigt, dass die Ergebnisse nach dem Monte-Carlo-Ansatz (bei ausreichend hoher Partikelanzahl und stark reduziertem Rechenaufwand) denen der deterministischen Rechnungen entsprechen. Bei einer mehrdimensionalen Variation ist eine Monte-Carlo-Rechnung demnach zu bevorzugen.

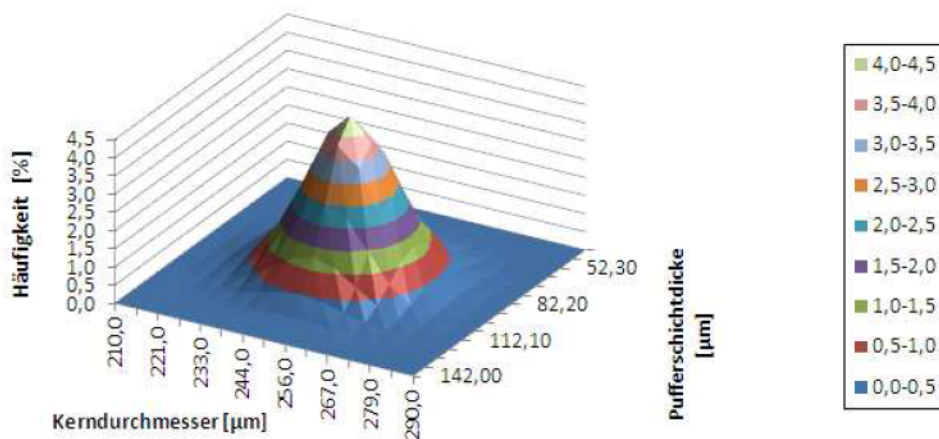


Abbildung 2.27: Häufigkeitsverteilung in Abhängigkeit von Kerndurchmesser und Pufferschichtdicke

Die innere Pyrokohlenstoffschicht spielt nur eine untergeordnete Rolle, da sie nur den inneren Radius der Siliziumkarbidschicht mitbestimmt. Die Verteilung der äußeren Pyrokohlenstoffschicht ist für das in PANAMA verwendete Druckkesselmodell bedeutungslos, da im Modell nur die Schichten bis zur Siliziumkarbidschicht berücksichtigt werden.

² In PANAMA wird das Formelzeichen ϕ für den Partikelbruchanteil verwendet und ist nicht mit einem Neutronenfluss zu verwechseln.

Eine Monte-Carlo-Simulation wurde durchgeführt, bei der für 30.000 beschichtete Partikel nach der jeweiligen Normalverteilung Kerndurchmesser und Dicke für den Puffer sowie die SiC-Schicht bestimmt wurden. Dabei bleiben Partikel, die die in Tabelle 2.4 aufgelisteten Kriterien nicht einhalten, unberücksichtigt. Mit diesen Größen wurde jeweils der Partikelbruchanteil als Funktion der Zeit nach dem PANAMA-Ansatz bestimmt.

In Abbildung 2.28 ist der Partikelbruchanteil bei einer Störfalltemperatur von 1.400°C dargestellt. Im Ausgangsfall gehen bzgl. der Partikelgeometrie nur Nennwerte ein. Von diesem Zustand aus wird jeweils die Verteilung der nächst äußeren Schicht, bei gleichzeitiger Beibehaltung der Nenndaten der anderen geometrischen Größen hinzugefügt. Es wird ersichtlich, dass die Standardabweichung des Puffers die sensitivste Größe ist. In diesem Beispiel wird der Partikelbruchanteil alleine durch die Berücksichtigung der Pufferschichtdickenverteilung um einen Faktor 8 vergrößert. Der Einfluss der Verteilung des Kerndurchmessers bzw. der Siliziumkarbidschicht ist mit einem Faktor von 1,15 bzw. 1,5 deutlich weniger ausgeprägt. Werden alle Verteilungen gleichzeitig betrachtet, so verstärken die Verteilungen sich gegenseitig. Insgesamt steigt der Partikelbruchanteil um einen Faktor von knapp 15 im Vergleich zur Rechnung mit den Nenndaten. Aus diesem Grund sollte bei der Herstellung von Partikeln nicht nur der Partikelkerndurchmesser geprüft werden, sondern auch die Summe aus Partikelkerndurchmesser und Pufferschichtdicke.

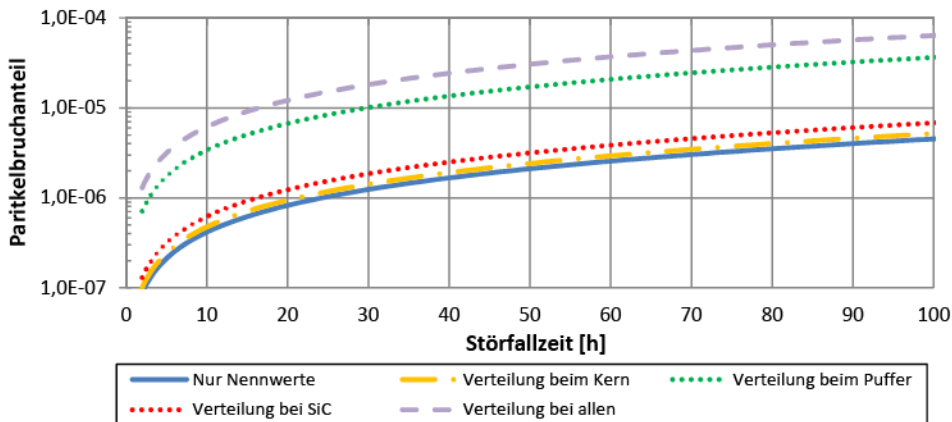


Abbildung 2.28: Berechnete Partikelbruchanteile im Störfall bei einer konstanten Störfalltemperatur von 1.400°C nach einer Bestrahlungszeit von 972 Tagen bei 900°C für verschiedene Szenarien (HTR-Modul, Monte-Carlo-Rechnung mit 30.000 Partikeln)

In Abbildung 2.28 ist der Einfluss der Schichtdickenverteilung für einen Zielabbrand von 8,5 FIMA und einer mittleren Bestrahlungstemperatur von 972°C dargestellt. Die Abbildung zeigt den zeitlichen Verlauf des Partikelbruchanteils einer Rechnung, bei der nur Partikel mit Nennwerten berücksichtigt werden, Rechnungen bei denen jeweils nur die Verteilung einer einzigen Schicht berücksichtigt wird und eine Rechnung bei der jede Schichtdickenverteilung berücksichtigt wird. Die Abbildung zeigt, dass die alleinige Berücksichtigung der Verteilung der Pufferschichtdicke im Vergleich zu den anderen Schichten die größte Auswirkung auf den berechneten Partikelbruchanteil hat. Der Einfluss der Schichtdickenverteilung der SiC-Schicht ist trotz der großen Bedeutung dieser Schicht aufgrund der relativ zu den anderen Schichten niedrigen Standardabweichung gering.

Wird die Rechnung für eine Reihe von Zielabbränden und mittlere Bestrahlungstemperaturen dargestellt, so ergibt sich das Kennfeld in Abbildung 2.29. Die Abbildung zeigt die Linien gleichen Partikelbruchanteils (Iso-Bruchanteillinien) der unterschiedlichen PANAMA-Rechnungen.

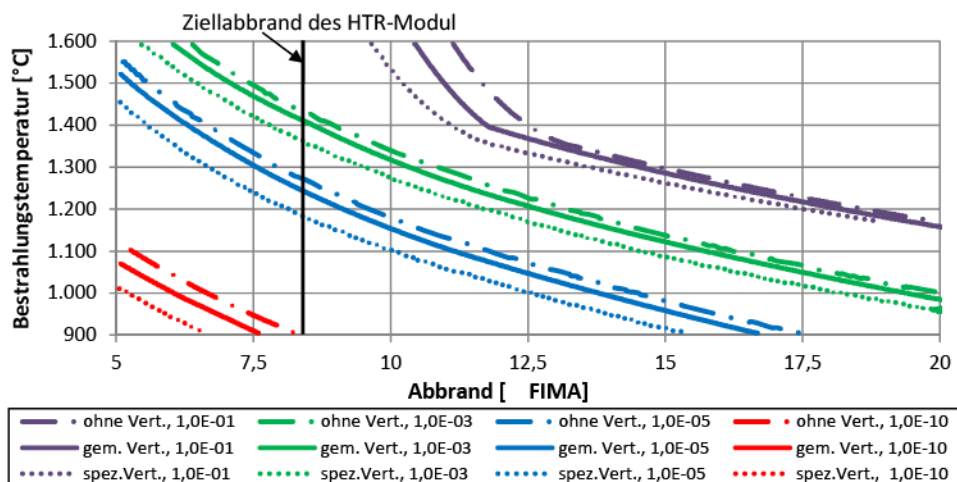


Abbildung 2.29: Linien gleichen Partikelbruchanteils nach PANAMA bei Verwendung unterschiedlicher Schichtdickenverteilungen (ohne Verteilung, mit gemessener Verteilung und mit einer spezifizierten Verteilung nach Brennstoffspezifikation)

Dabei werden die Iso-Bruchanteillinien gezeigt für Rechnungen ohne Berücksichtigung der Verteilung und Rechnungen, die eine gemessene bzw. spezifizierte Verteilung berücksichtigen. Die Linien beschreiben die Abhängigkeit der Bestrahlungstemperatur vom Zielabbrand für einen vorgegebenen Bruchanteil. Vor allem der Unterschied zwischen den Isolinien ohne Berücksichtigung der Schichtdickenverteilung im Vergleich zu den Linien mit Berücksichtigung der spezifizierten Schichtdickenverteilungen ist groß. Dies hat zur Folge, dass z. B. bei einem Zielabbrand von 8,5 FIMA und einem vorgegebenem Partikelbruchanteil die Bestrahlungstemperatur um etwa 100°C reduziert werden müsste, um beide Vorgaben gleichzeitig einzuhalten. Die Differenz zwischen den Isolinien ohne Berücksichtigung der Verteilungen und den Linien mit Berücksichtigung der gemessenen Verteilung ist deutlich kleiner. Demnach ist es empfehlenswert, die in den Brennstoffspezifikationen definierten zulässigen Standardabweichungen an die gemessenen Standardabweichungen anzugleichen, um eine deutliche Erhöhung der Partikelbruchanteile zu vermeiden.

Die Berücksichtigung der Schichtdickenverteilungen bei der Berechnung der Partikelbruchanteile hat also einen großen Einfluss auf die Ergebnisse. Für zukünftige Rechnungen wird daher empfohlen, die Schichtdickenverteilungen in der Rechnung mit einzubeziehen. Dabei ist der probabilistische Ansatz aufgrund der geringeren Rechenzeit bei vergleichbaren Ergebnissen zu bevorzugen. Für bisherige Rechnungen gilt, dass die angenommene Temperaturüberhöhung im Partikel, die sich als sehr konservativ herausgestellt hat, in etwa die Differenz bei dem berechneten Partikelbruchanteil, die durch ein Vernachlässigen der Schichtdickenverteilungen entsteht, für den hier gezeigten Fall teilweise kompensiert.

2.5.5 Verwendung der Realgasgleichung

In der Vergangenheit wurde von Experten eine Liste mit modelltechnischen Verbesserungsvorschlägen im Bereich der Partikelbruchanteil- und Spaltproduktfreisetzungsberechnung erstellt [IEA1997]. Einer der Erweiterungsvorschläge ist die Druckberechnung in den Partikeln nach der Redlich-Kwong-Gasgleichung (Realgasgleichung) anstelle der idealen Gasgleichung, wie sie im PANAMA-Code erfolgt. Bei sehr hohen inneren Drücken, die in den Partikeln auftreten können, ist die Annahme eines idealen Gases nicht mehr zutreffend. In diesem Abschnitt wird die Redlich-Kwong-Gasgleichung diskutiert und Vergleichsberechnungen mit PANAMA unter Einbeziehung beider Gasgleichungen vorgestellt.

Die Redlich-Kwong-Gasgleichung ist wie folgt definiert [RED1949]:

$$R_G \cdot T = \left(p_i + \frac{a}{\sqrt{T} \cdot V_m \cdot (V_m + b)} \right) (V_m - b) \quad 2.27$$

mit:	p_i	- Partialdruck	$[\text{N/m}^2]$
	T	- Temperatur	$[\text{K}]$
	b	- Kovolumen	$[\text{m}^3/\text{mol}]$
	R_G	- universelle Gaskonstante	$[\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})]$
	a	- Kohäsionsdruck	$[\text{Pa} \cdot \text{m}^6]/\text{mol}^2$
	V_M	- Molares Volumen	$[\text{m}^3/\text{mol}]$

Der Kohäsionsdruck a berechnet sich nach folgender Gleichung [RED1949]:

$$a = \frac{0,42748 \cdot R_G^2 \cdot T_c^{2,5}}{p_c} \quad 2.28$$

mit:	p_c	- kritischer Druck	$[\text{N/m}^2]$
	T_c	- kritische Temperatur	$[\text{K}]$

Der kritische Druck und die kritische Temperatur sind Stoffkonstanten, die für alle Isotope eines Elementes gleich sind. Aus der Herleitung der Van-der-Waals Zustandsgleichung ergibt sich, dass der Beitrag der kinetischen Energie mit dem massenabhängigen Term zur freien Energie als temperaturabhängiger Term erscheint. Der Druck ist die partielle Ableitung der Zustandsgleichung nach dem Volumen. Demnach fällt dieser temperaturabhängige Term bei der Bildung der partiellen Ableitung weg. Das Kovolumen b ist gegeben durch folgende Gleichung [RED1949]:

$$b = \frac{0,08664 \cdot R_G \cdot T_c}{p_c} \quad 2.29$$

Bei vorgegebenen Stoffdaten sowie gegebenen Bildungsraten der Spaltgase und des Kohlenmonoxids, lassen sich das molare Volumen und somit auch der Druck bestimmen. Abbildung 2.30 zeigt den zeitlichen Druckverlauf für ein typisches Brennstoffpartikel eines HTR-Modul-Brennelements im Verlaufe seiner Lebensdauer für beide Gasgleichungsansätze. Aus dem Vergleich wird ersichtlich, dass der Druckverlauf unter Verwendung der Redlich-Kwong-Druckgleichung sehr ähnlich zu dem mit der idealen Gasgleichung ist.

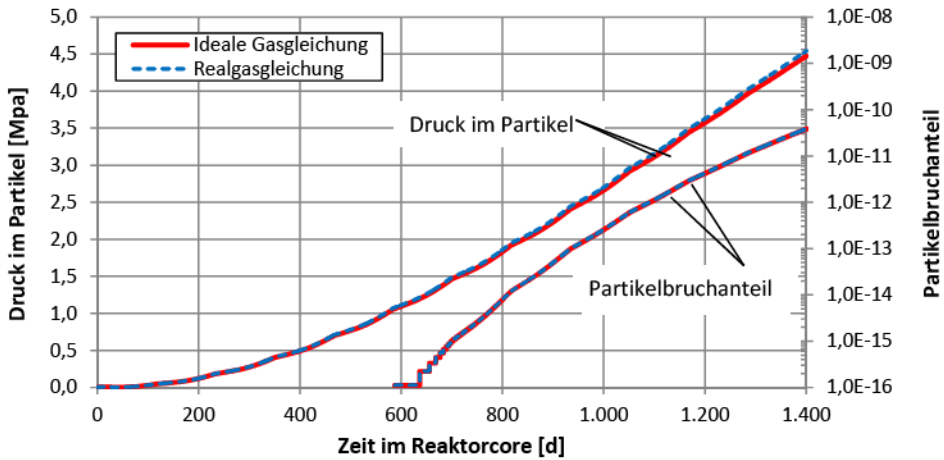


Abbildung 2.30: Druck im Partikel und Partikelbruchanteil eines HTR-Modul-Brennelements in Abhängigkeit der Zeit (15 Durchläufe entlang der Mittelachse) [BEX2010]

Abbildung 2.31 zeigt, dass die unterschiedliche Berechnung des Drucks im Partikel sich erst bei sehr viel höheren Abbränden bemerkbar macht. Sogar bei deutlich höheren Zielabbränden als in derzeitigen Brennstoffkonzepten vorgesehen, sind die Druckdifferenzen im Vergleich zu den Unsicherheiten im Modell vernachlässigbar. Beim NGNP-Konzept wird der höchste Zielabbrand angestrebt. Bei dem Brennstoffkonzept kommt UCO-Brennstoff zum Einsatz, bei dem die Bildung von Kohlenmonoxid weitgehend unterbunden wird und demnach geringere Partikeldrücke entstehen.

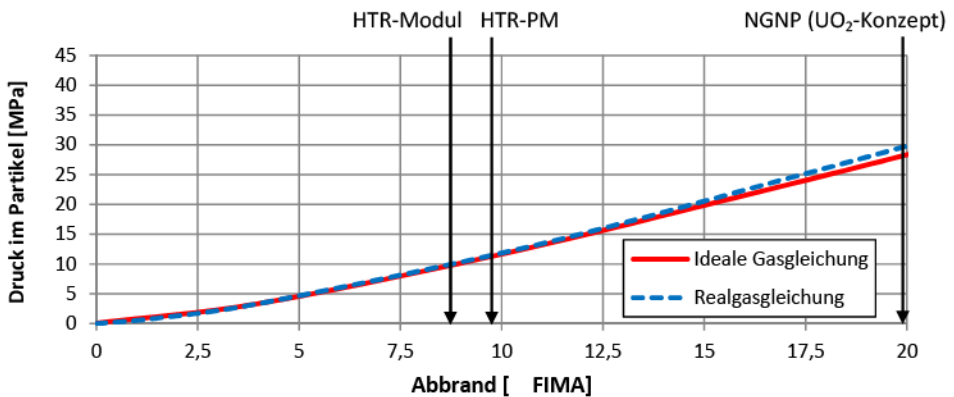


Abbildung 2.31: Druckverlauf im Partikel über die Lebensdauer im Reaktorcore und Vergleich mit den Zielabbränden für unterschiedliche Reaktorkonzepte (UO₂-Brennstoff)

Somit kann festgehalten werden, dass eine detailliertere Modellierung der Gasgleichung keinen wesentlichen Einfluss auf die Berechnung des Partikelbruchanteils für die derzeit betrachteten Reaktorkonzepte hat.

2.5.6 Erweiterung von STACY auf zylinderförmige Compacts

FRESCO-II beinhaltet lediglich die Freisetzungsberechnung für kugelförmige Brennelemente. STACY wurde deshalb hinsichtlich der Freisetzung von Spaltprodukten aus zylinderförmigen Compacts erweitert. In diesem Abschnitt wird das Gleichungssystem hergeleitet, dass die Fick'sche Diffusion in Zylinderkoordinaten berechnet. Mit diesem Gleichungssystem können sowohl Hohlzylinder, wie die Compacts im japanischen Brennstoffkonzept, als auch Vollzylinder, wie die Compacts im US-Brennstoffkonzept, sowie auch Diffusion in den Kanälen des Decken- und Bodenreflektors betrachtet werden.

Numerische Lösung der Fick'schen Diffusionsgleichung in Zylinderkoordinaten

Der in der Realität vorliegende komplexe dreidimensionale Transportvorgang wird zu einem eindimensionalen Problem vereinfacht (siehe Abbildung 2.32). Betrachtet wird ein Zylinder unendlicher Länge. Konzentrationsunterschiede in vertikaler Richtung werden vernachlässigt. Der Zylinder wird in Schalen unterteilt, wobei die Stützstellen beliebig eingeteilt werden können. Hierbei sollte allerdings das Courant-Kriterium eingehalten werden, nach dem die gewählte Zeitschrittgröße in jedem Falle kleiner als der Quotient aus Gittermaschenweite und Diffusionsgeschwindigkeit sein muss.

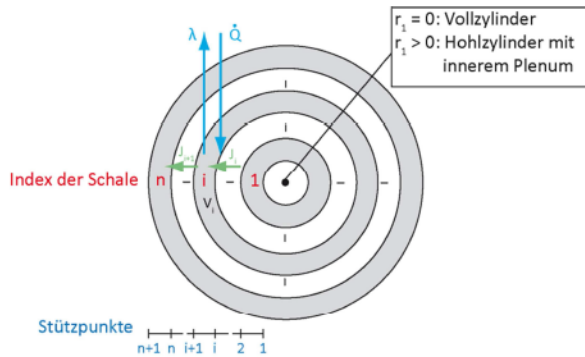


Abbildung 2.32: Diskretisierungsvolumen eines Compacts in der Fick'schen Diffusionsrechnung

Die Inventaränderung in jeder zylinderförmigen Schale lässt sich nach folgender Gleichung bestimmen³:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_i} c \, dV = \frac{1}{\Delta t} \left[\int_{V_i} c^{t+1} \, dV - \int_{V_i} c^t \, dV \right] \quad 2.30$$

Die Inventaränderung setzt sich zusammen aus einem Bildungsterm, einem Zerfallsterm und zwei Termen, die den Austausch mit den benachbarten Schalen berücksichtigen. Sie lässt sich demnach wie folgt schreiben:

$$\frac{1}{V_i} \left[\int_{V_i} c^{t+1} \, dV - \int_{V_i} c^t \, dV \right] = \dot{Q} \cdot \Delta t - \lambda \frac{\Delta t}{V_i} \int_{V_i} c^{t+1} \, dV + J_i \frac{A_i}{V_i} \Delta t - J_{i+1} \frac{A_{i+1}}{V_i} \Delta t \quad 2.31$$

³ Aus Darstellungsgründen wurde „SP“ bei den Spaltproduktkonzentrationen im Index weggelassen

mit:	\dot{Q}	- volumenspezifische Bildungsrate einer Schale	$[\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})]$
	t	- Index des Zeitschrittes	
	λ	- Zerfallskonstante	$[1/\text{s}]$
	J	- Diffusionsstrom	$[\text{mol}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})]$

Der Diffusionsstrom J_{i+1} aufgrund der Fick'schen Diffusion durch die Außenseite der Schale lässt sich nach folgender Gleichung bestimmen:

$$J_{i+1} = -D_i \frac{c_{i+1}^{k+1} - c_i^{k+1}}{r_{i+1} - r_i} \quad [1/(\text{m}^2 \cdot \text{s})] \quad 2.32$$

mit:	D_i	- Diffusionskoeffizient in der Schale „i“	$[\text{m}^2/\text{s}]$
------	-------	---	-------------------------

Analog kann der Diffusionsstrom durch die Innenseite beschrieben werden. Das Konzentrationsprofil einer jeden Schale wird abgesehen von der innersten Schale als linear über den Radius approximiert. Das Inventar einer solchen Schale berechnet sich zu:

$$\text{Inv}_i = \int_{V_i} \left[c_i + \left(\frac{c_{i+1} - c_i}{r_{i+1} - r_i} \right) (r - r_i) \right] \cdot h_{\text{Zyl}} \cdot 2\pi \cdot r \cdot dr \quad [\text{mol}] \quad 2.33$$

mit:	h_{Zyl}	- Zylinderhöhe	$[\text{m}]$
------	------------------	----------------	--------------

Insgesamt ergibt sich folgende Gleichung:

$$\frac{\text{Inv}_i}{V_i} = c_i + \left(\frac{c_{i+1} - c_i}{r_{i+1} - r_i} \right) \cdot \frac{2}{r_{i+1}^2 - r_i^2} \left[\frac{r_{i+1}^3 - r_i^3}{3} - \frac{r_{i+1}^2 \cdot r_i - r_i^3}{2} \right] = \beta \cdot c_i + (1 - \beta) \cdot c_{i+1} \quad 2.34$$

Aus Darstellungsgründen wurde der Zeitindex t weggelassen. Die innerste Schale wird im Falle eines Vollzylinders getrennt betrachtet, während bei einem Hohlzylinder der Konzentrationsverlauf der innersten Schale auch als linear angenommen wird. Das Konzentrationsprofil in der innersten Schale eines Vollzylinders wird als parabelförmig angenommen:

$$c(r) = c_2 - 2 \frac{c_2 - c_1}{r_2 - r_1} (r - r_2) - \frac{c_1 - c_2}{(r_2 - r_1)^2} (r - r_2)^2 \quad [\text{mol}/\text{m}^3] \quad 2.35$$

Diese Funktion gewährleistet, dass die Randbedingung in Form der Konzentrationen auf der Innen- und Außenseite der innersten Schale getroffen werden und dass der Gradient auf der Innenseite gleich Null ist. Hiermit wird die geforderte Rotationssymmetrie sichergestellt. Ausformuliert berechnet sich das Inventar der innersten Schale nach folgender Gleichung:

$$\text{Inv}_1 = c_2 \cdot \frac{1}{2} r^2 - 2 \left(\frac{c_1 - c_2}{r_2 - r_1} \right) \cdot \left(\frac{1}{3} r^3 - r_2 \frac{r^2}{2} \right) - \frac{c_1 - c_2}{(r_2 - r_1)^2} \left(\frac{1}{4} r^4 - \frac{2}{3} r^3 r_2 + \frac{1}{2} r_2^2 r^2 \right) \quad [\text{mol}] \quad 2.36$$

Beim Vollzylinder gibt es nur an der Außenseite einen austretenden Diffusionsstrom. Beim Hohlzylinder gibt es prinzipiell einen Austausch über die innere und äußere Mantelfläche. Der Diffusionsstrom auf der innen liegenden Fläche wird bestimmt nach:

$$J_{In} = \alpha \cdot \beta \cdot (c(1) - c_{Plenum}) \quad [1/(m^2 \cdot s)] \quad 2.37$$

mit: c_{Plenum} - Spaltproduktkonzentration im Plenum [m]

Bei „n“ Schalen liegen „n+1“ Stützpunkte vor. Für jede Schale wird eine Bilanzgleichung aufgestellt. Das Gleichungssystem wird vervollständigt durch die Randbedingung an der äußeren Begrenzungsfläche. Die Stoffströme bedingt durch Fick'sche Diffusion im Festkörper und Konvektion sollen gleich sein:

$$-D \frac{c_{n+1} - c_n}{r_{n+1} - r_n} = \alpha \cdot \beta \cdot (c_{n+1} - c_{He}) \quad [1/(m^2 \cdot s)] \quad 2.38$$

mit: α - Haftkoeffizient
 β - Stoffübergangskoeffizient [m/s]
 c_{He} - Konzentration im Kühlgas [mol/m³]

Diese Gleichungen bilden ein tridiagonales Gleichungssystem, das mit einem Gauß'schen Lösungsverfahren für jeden Zeitschritt gelöst wird. Das Aufstellen und Lösen des Gleichungssystems wird sowohl für die Simulation von Compacts als auch für die Bohrungen der Reflektoren verwendet.

Verifikation der Diffusionsrechnung in zylindrischen Körpern

Zur Simulation der Spaltproduktfreisetzung von Blockreaktoren wurde STACY um die Beschreibung der Fick'schen Diffusion in Matrixgraphit erweitert. Aufgrund der Tatsache, dass FRESCO-II an vielen Experimenten validiert und an anderen Simulationsmodellen bei verschiedenen Benchmarks verifiziert wurde [VER2012], wird eine realitätsnahe Abbildung der Freisetzungsprozesse unterstellt, und es ist davon auszugehen, dass alle relevanten Prozesse ausreichend gut durch die Software beschrieben werden. Die Modellierung und Implementierung der Fick'schen Diffusion in zylinderförmigen Compacts als neues Modell soll jedoch überprüft werden.

Unter Anwendung einiger Vereinfachungen lässt sich die Freisetzung aus einer sphärischen Geometrie durch die analytische Booth-Gleichung [BOO1957] berechnen. Diese Gleichung wurde zum ersten Mal zur analytischen Beschreibung der diffusionsbedingten Freisetzung stabiler Edelgase eingesetzt [BOO1957] und berücksichtigt einen Bildungsterm für die Spaltprodukte und den radioaktiven Zerfall. Ein solcher Fall ist die Freisetzung aus einem Hohlzylinder jedoch nicht. Die Umsetzung und Implementierung dieses Gleichungssystems wurde mit Hilfe verschiedener analytisch lösbarer Fälle aus [CRA1979, LUE2000] verifiziert, allerdings ohne Berücksichtigung eines inneren Bildungsterm bzw. des Zerfalls. In beiden Fällen wird ein in Richtung der Längsachse unendlich ausgedehnter Hohlzylinder betrachtet. Diese Vereinfachung stimmt mit der Annahme beim hergeleiteten Differentialgleichungssystem überein. Im ersten Fall ist das Konzentrationsprofil zu Beginn gleich c_0 . An beiden Begrenzungsflächen liegt danach eine konstante Konzentration c_1 vor. Je nach Konzentrationsgefälle gibt es einen Nettostrom nach innen oder außen. Das radiale Konzentrationsprofil lässt sich in diesem Fall nach folgender Gleichung bestimmen [CRA1979]:

$$\frac{c(r,t) - c_0}{c_1 - c_0} = 1 - \pi \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0(R_i \cdot \alpha_n) \cdot [Y_0(R_a \cdot \alpha_n) \cdot J_0(r \cdot \alpha_n) - J_0(R_a \cdot \alpha_n) \cdot Y_0(r \cdot \alpha_n)]}{J_0(R_i \cdot \alpha_n) + J_0(R_a \cdot \alpha_n)} \cdot e^{-D \cdot \alpha_n^2 \cdot t} \quad 2.39$$

mit:	$J_0(x)$	- Bessel-Funktion vom Typ eins und der Ordnung null	
	$Y_0(x)$	- Bessel-Funktion vom Typ zwei und der Ordnung null	
	c_0	- Anfangskonzentration	[mol/m ³]
	c_1	- Konzentration in der Umgebung (= konstant)	[mol/m ³]
	R_i	- Innenradius	[m]
	R_a	- Außenradius	[m]
	r	- Radius ($R_i \leq r \leq R_a$)	[m]
	α_n	- Nullstellen der Gleichung 2.40	

Die einzelnen Summationsterme verringern sich mit zunehmendem Index „n“. Die unendliche Summe kann demnach an der Stelle abgebrochen werden, wo das n-te Glied die bis dahin ermittelte Summe nur noch unwesentlich, d. h. im Bereich der numerischen Präzision, ändert. Die Parameter α_n sind die ersten „n“ positiven Nullstellen folgender Gleichung [CRA1979]:

$$J_0(R_i \cdot \alpha_n) \cdot Y_0(R_a \cdot \alpha_n) - Y_0(R_i \cdot \alpha_n) \cdot J_0(R_a \cdot \alpha_n) = 0 \quad 2.40$$

Diese Nullstellen werden mittels Intervallschachtelung bestimmt [ARE2009]. Die Menge, die bis zum Zeitpunkt t über die Grenzfläche geflossen ist, im Verhältnis zu der Menge, die bis zum Erreichen eines Konzentrationsgleichgewichtes die Bilanzfläche durchquert hat, lässt sich mit folgender Gleichung bestimmen [CRA1979]:

$$\frac{\Delta \text{Inv}(t)}{\Delta \text{Inv}_{\text{Ende}}} = 1 - \frac{4}{R_a^2 - R_i^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0(R_i \cdot \alpha_n) - J_0(R_a \cdot \alpha_n)}{\alpha_n^2 \cdot [J_0(R_i \cdot \alpha_n) + J_0(R_a \cdot \alpha_n)]} \cdot e^{-D \cdot \alpha_n^2 \cdot t} \quad 2.41$$

Die Konzentrationsprofile nach der analytischen Gleichung 2.39 und dem Finite Volumenverfahren in STACY, sind für verschiedene Zeitpunkte in Abbildung 2.33 gegenübergestellt. Die Ergebnisse sind deckungsgleich.

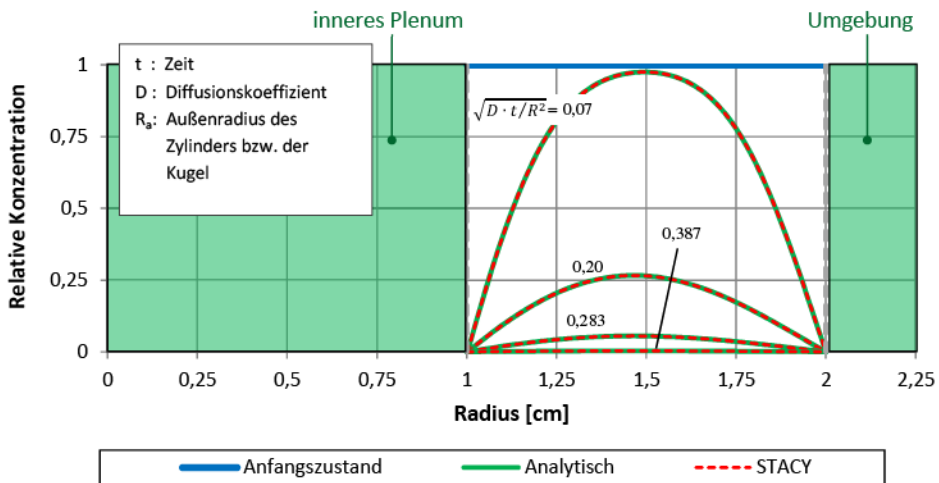


Abbildung 2.33: Vergleich der zeitlichen Entwicklung des Konzentrationsprofils im Hohlzylinder der zwischen der analytischen Lösung und der STACY-Rechnung

In einem weiteren analytisch lösbaren Fall aus [CRA1979] wird die Freisetzung eines Vollzylinders betrachtet, wobei allerdings die Konzentration im umgebenden Medium nicht konstant ist. Als Ausgangszustand liegt ein konstantes Konzentrationsprofil über den gesamten Zylinderradius und reines Helium als Umgebungsmedium vor. Mit der Zeit diffundiert ein Teil des anfänglichen Zylinderinventars in das Umgebungsmedium. Die Konzentration steigt deshalb allmählich an, bis ein Gleichgewicht erreicht wird. Es gibt keinen Bildungsterm im Festkörpervolumen und ein Zerfall wird nicht betrachtet. Dieser Vorgang stimmt gut mit dem auf der Innenseite des Compacts ablaufenden Vorgang überein und ist demnach zur Verifizierung des erstellten Gleichungssystems geeignet.

Die Stoffmenge, die den Zylinder zum Zeitpunkt t verlassen hat, $(\Delta \text{Inv}(t))$, bezogen auf die Menge, die insgesamt bis zum Erreichen des Gleichgewichts heraus- bzw. hineindiffundiert ist $(\Delta \text{Inv}_{\text{Ende}})$, lässt sich für diese Gegebenheiten nach folgender Gleichung beschreiben [CRA1979]:

$$\frac{\Delta \text{Inv}(t)}{\Delta \text{Inv}_{\text{Ende}}} = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4\alpha(1+\alpha)}{4 + 4\alpha + \alpha^2 \cdot q_n^2} \cdot e^{-\frac{D \cdot q_n^2 \cdot t}{R_a^2}} \quad 2.42$$

wobei die Faktoren q_n die von Null verschiedenen Nullstellen folgender Gleichung sind:

$$\alpha \cdot q_n \cdot J_0(q_n) + 2 \cdot J_1(q_n) = 0. \quad 2.43$$

Die Ergebnisse für diesen analytisch lösbaren Fall sind in Abbildung 2.34 dargestellt.

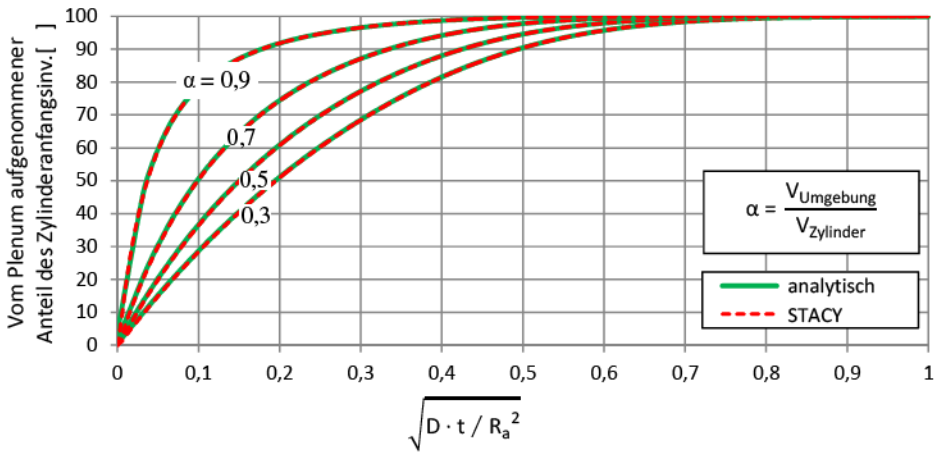


Abbildung 2.34: Vom Umgebungsmedium aufgenommener Anteil des Zylinderanfangsinventars als Funktion der Zeit für verschiedene Verhältnisse des Umgebungs- zum Zylindervolumen „ α “

Hier ist der vom Umgebungsmedium aufgenommene Anteil des anfänglichen Zylinderinventars als Funktion der dimensionslosen Zeit dargestellt. Die Ergebnisse sind für unterschiedliche Werte des Parameters α dargestellt, der das Verhältnis aus Umgebungs- zu Zylindervolumen darstellt. Je größer das betrachtete Umgebungsvolumen, desto höher ist der vom Zylinderanfangsinventar bis zum Erreichen des Gleichgewichts abfließende Anteil. Zum Vergleich wurden diese analytischen Fälle mit STACY nachgerechnet. Die Ergebnisse der diskretisierten Diffusionsgleichung sind für den hier betrachteten Fall deckungsgleich mit der entsprechenden analytischen Lösung.

Des Weiteren wurde der Fall betrachtet, dass die innere Fläche des Hohlzylinders undurchlässig ist und nur ein Austausch über die äußere Begrenzungsfläche stattfinden kann. Auch in dieser Rechnung wurde die Richtigkeit des Modells bestätigt. Darüber hinaus wurden andere Fälle, bei denen Zerfall und Bildungsterm berücksichtigt werden, verifiziert. Da die numerischen Ergebnisse für diese Fälle alle relevanten Phänomene abdecken und mit den analytischen Ergebnissen übereinstimmen, kann die Implementierung der Fick'schen Diffusionsgleichung in zylinderförmiger Geometrie als verifiziert gelten.

Simulation eines Compacts aus der AGR-1-Versuchsreihe

Nachdem die Erweiterung an Hand analytisch lösbarer Fälle verifiziert ist, werden in diesem Abschnitt die Rechenergebnisse eines Compacts mit entsprechenden Messdaten verglichen. Im Rahmen des NGNP-Programms des US-DOE (*Department Of Energy*) werden zum weiteren Verständnis und zur Selektion des Brennstoffs Compacts bestrahlt und anschließend untersucht. Dazu gehören u. a. Störfallsimulationsexperimente. Diese Versuche sollen auch als weitere Unterstützung in der Genehmigungsphase dienen [PET2012].

Die Produktion der Brennstoffkerne fand im industriellen Maßstab statt, wohingegen das Beschichten und das anschließende Pressen zu zylinderförmigen Compacts im Labormaßstab abliefen [PET2012]. Innerhalb der Testreihe AGR-1 wurden 72 Compacts mit Brennstoff aus Uranoxykarbid (UCO) über 620 Volllasttage im Advanced Gas Reactor (AGR) bestrahlt. Dabei wurden die Compacts von sechs verschiedenen Kapseln (Bestrahlungsbehältnissen) aufgenommen, wobei jeweils drei Stapel von je vier Compacts in einer Kapsel untergebracht waren (siehe Abbildung 2.35a).

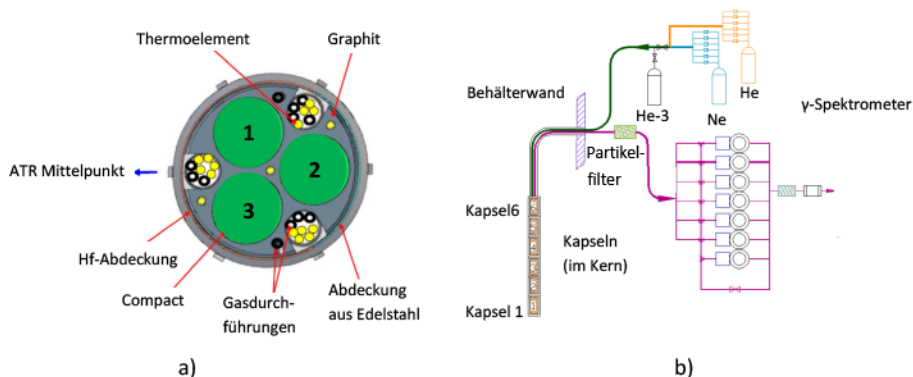


Abbildung 2.35: Aufbau des AGR-1-Versuchsstandes

- a) Anordnung der Compacts in einer Kapsel, nummeriert sind die Stapel [HAN2012] (überarbeitet)
- b) Anordnung der Kapseln [SCA2008] (überarbeitet)

Die Bestrahlung begann in Dezember 2006 und war in November 2009 abgeschlossen [PET2012]. Die Ziele bezüglich Endabbrand, schneller Neutronenfluenz und mittlerer Bestrahlungstemperatur wurden im Durchschnitt erreicht.

Von den insgesamt 72 bestrahlten Compacts wurden 18 Compacts aufgrund bestimmter Kriterien, wie z. B. erreichter Zielabbrand, ausgewählt, um anschließend über 300 - 400 Stunden bei einer Temperatur von 1.600 - 1.800°C ausgeheizt zu werden [MOR2012]. Wie bei der KüFA-Anlage wird

dabei die Kr-85-Freisetzung kontinuierlich gemessen. Die freigesetzten metallischen Spaltprodukte werden in gekühlten Ablagerungsbechern aufgefangen, die alle 12 bis 24 Stunden ausgetauscht werden [MOR2012]. Die Freisetzung metallischer Spaltprodukte wird analog zur KÜFA diskontinuierlich gemessen (siehe Abbildung 2.35b).

Bis dato wurden insgesamt fünf Compacts ausgeheizt, wobei Compact 6-4-3 (Kapsel 6, Compact 4, Stapel 3) zusätzlich vollständig zerlegt und analysiert wurde. Das betrachtete Compact wurde bei einer mittleren Temperatur von 1.041°C bestrahlt [COL2012, HAN2012]. Der Endabbrand betrug 13,325 FIMA bei einer schnellen Neutronenfluenz von $2,46 \cdot 10^{25} \text{ n/m}^2$ ($E > 0,18 \text{ MeV}$) [COL2012]. In dem anschließenden Heiztest wurde die Temperatur in drei Stufen auf die Endtemperatur von 1.600°C gebracht [COL2012]. Die ursprünglich geplante Versuchsdauer wurde von 300 auf 400 Stunden verlängert, weil kein Partikel bis zum geplanten Versuchsende versagt hatte [MOR2012]. Die relativen Freisetzungen einiger ausgewählter Nuklide während des Heiztests von Compact 6-4-3 sind in Abbildung 2.36 dargestellt.

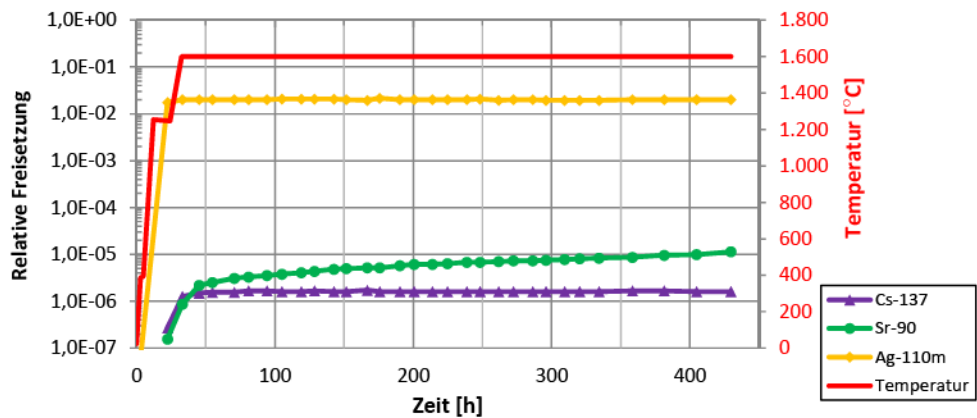


Abbildung 2.36: Relative Freisetzung einiger ausgewählter Isotope aus dem Compact AGR-1/6-4-3 bei einer Heiztemperatur von 1.600°C [MOR2012] (eigene Darstellung)

Das Experiment wurde mit STACY nachgerechnet. Die Geometriedaten des Compacts und der Brennstoffpartikel sind in Tabelle 2.8 dargestellt.

Tabelle 2.8: Geometriedaten des Compacts AGR-1/6-4-3

Eigenschaft		Nennmaß
Radius des Partikelkerns	[µm]	174,85
Pufferschichtdicke	[µm]	103,5
IPyC-schichtdicke	[µm]	39,4
SiC-schichtdicke	[µm]	35,3
OPyC-schichtdicke	[µm]	41,0
Höhe des Compacts	[cm]	2,5
Durchmesser des Compacts	[cm]	1,236
Partikelanzahl		4.154

Vereinfachend wurde die mittlere Bestrahlungstemperatur als konstant angenommen. Das Experiment wurde mit dem vom Idaho National Laboratory (INL) entwickelten Programm PARFUME [MIL2004] nachvollzogen. Neben der Spaltproduktfreisetzungsberechnung berechnet PARFUME Partikelversagenswahrscheinlichkeiten bedingt durch thermische, mechanische und chemische Belastungen [COL2012]. Das Programm befindet sich in der Entwicklungsphase. Eine erste Verifikation und Validierung, die durch die Heiztests unterstützt werden sollen, ist noch nicht abgeschlossen. Laut PARFUME-Vorhersagerechnung ist beim Versuch nicht mit Partikelversagen zu rechnen [COL2012]. Somit wurde auch kein Defektpartikel in der STACY-Rechnung angesetzt. In der Literatur wurden keine Angaben zu den Uranverunreinigungen außerhalb des Partikelkerns gefunden. Deshalb wurden für den deutschen Referenzbrennstoff typische Werte für die Rechnung angenommen. Für die Diffusionskoeffizienten wurden die von Deutschland empfohlenen Diffusionskoeffizienten angenommen [IAE1997].

Die mit STACY berechnete Cs-137- und Sr-90-Freisetzung sind in Abbildung 2.37 dargestellt. Auffällig ist, dass die gemessenen Freisetzungsteile beider Nuklide auf einem sehr niedrigen Niveau bleiben und die berechneten Anteile jeweils um Größenordnungen unterschritten werden. Obwohl es am Anfang zu Diskrepanzen von maximal einer Größenordnung zwischen den Ergebnissen beider Rechenprogramme kommt, sind sie ab ungefähr 200 Stunden sehr ähnlich. Die Unterschiede in der Anfangsphase lassen sich möglicherweise auf unterschiedliche Annahmen, z. B. die Uranverteilung, zurückführen. Dies konnte allerdings nicht abschließend geklärt werden.

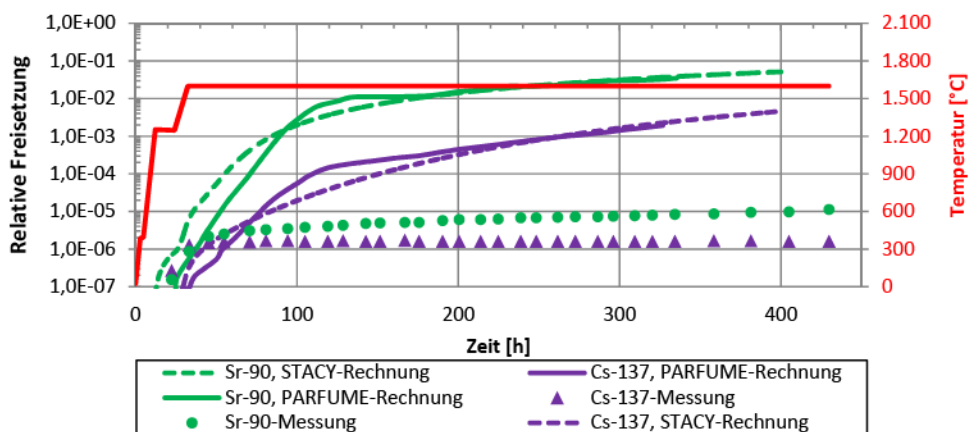


Abbildung 2.37: Mit STACY berechnete Freisetzungsteile im Vergleich zu den mit PARFUME gerechneten sowie den gemessenen Anteilen für das Compact AGR-1/6-4-3 bei einer Heiztemperatur von 1.600°C

Insgesamt kann gefolgert werden, dass beide Rechenprogramme für diesen Test recht ähnliche Ergebnisse liefern. Die erkennbaren Unterschiede zwischen den Ergebnissen der beiden Codes einerseits und die Messungen andererseits sollen jedoch weiter untersucht werden. Da in der Rechnung lediglich intakte Partikel und U-235-Kontaminationen betrachtet wurden, werden die möglichen Variationen erheblich eingeschränkt. Eine mögliche Erklärung ist, dass die Materialien, bedingt durch (kleinere) Änderungen im Herstellungsprozess im Vergleich zu denen bei dem Referenzbrennelement, nicht durch die angenommenen Diffusionskoeffizienten beschrieben werden können.

3 Entwicklung eines Modells zur räumlich aufgelösten Spaltproduktfreisetzung

3.1 Einführung in die räumlich aufgelöste Spaltproduktfreisetzung

Bisher wurde stets nur der zeitliche Verlauf des Partikeldefektanteils sowie das Freisetzungsverhalten einzelner Brennelemente sowohl unter Normalbetriebs- als auch Störfallbedingungen betrachtet. Dabei ist der zeitliche Verlauf der Brennelementtemperatur ein Hauptbestandteil der Eingabe. Optional kann ein gemessener bzw. berechneter Inventarverlauf in der Freisetzungsrechnung berücksichtigt werden, welcher allerdings vom Anwender bereitgestellt werden muss. Diese Art von Rechnungen können nach wie vor mit dem Code „STACY Stand-Alone“ durchgeführt werden. Dabei sind die auf FRESCO-II basierenden Berechnungsroutinen sowie die in Kapitel 2 diskutierten Erweiterungen die Grundbausteine für die Bestimmung der Bruchanteile und Spaltproduktfreisetzungsraten.

Bei einer räumlich hoch aufgelösten Berechnung der Spaltproduktfreisetzung müssen jedoch eine Vielzahl verschiedener Brennelemente und deren Zustandsänderungen beim Fließen durch das Core betrachtet werden (siehe Abbildung 3.1).

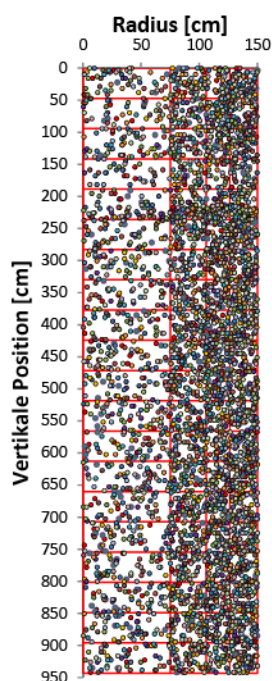


Abbildung 3.1: Verteilung der Tracer-Brennelemente im HTR-Modul-Gleichgewichtscore (sortiert nach der aktuellen Durchlaufzahl, repräsentiert durch verschiedene Farben) zu einem willkürlichen Zeitpunkt (nicht maßstabsgetreu dargestellt)

Um dies zu realisieren, wurde ein statistisches Verfahren entwickelt, welches es erlaubt, mit einer problemabhängig zu ermittelnden Anzahl an Brennelementkugeln (typischerweise 5 des Gesamtinventars) eine repräsentative Aussage über das Brennelementverhalten des gesamten Cores treffen zu können [XHO2012b]. Dabei wird die „Spur“ von zufällig ausgewählten Brennelementkugeln, so genannter „Tracer-Brennelemente“, während des Reaktorbetriebs im Detail nachvollzogen und deren Freisetzungsverhalten über ihre gesamte Lebensdauer beobachtet. Abbildung 3.1 zeigt beispielsweise die Position aller Tracer-Brennelemente zu einem bestimmten Zeitpunkt im Gleichgewichtscore des HTR-Modul. Die Simulation des Kugelfließens wird dabei von einem neu entwickelten Kugelfließmodell übernommen. Dieses Modell ist eine erweiterte Fassung des Stromröhrenmodells aus VSOP. Sowohl die Neutronenfluss- als auch Kühlmitteltemperaturverteilung werden als Bestandteil einer Core-Auslegungsrechnung dem Programmpaket VSOP entnommen. Um eine Aussage über exakte Mengen freigesetzter Nuklide machen zu können, wird jedes Tracer-Brennelement abbrandtechnisch behandelt. Hierzu wurde eine Kopplung an das Programm TNT (*Topological Nuclide Transmutation*) entwickelt. Des Weiteren wurde die räumliche Umverteilung von Spaltprodukten durch Konvektion und Diffusion im Kühlgas betrachtet. Da dieses Verfahren den ganzen Reaktor betrachtet, wird das entwickelte Programmpaket „STACY Fullcore“ genannt.

Die Berechnungskette und der Datenfluss zwischen den einzelnen Programmen ist in Abbildung 3.2 dargestellt. Eine detaillierte Beschreibung des Programmablaufs ist in Anhang 9 dargestellt. Die Berechnungsmethoden, welche für einzelne Tracer-Brennelemente durchgeführt werden (z. B. die Abbrand-, Partikeldefektanteil-, Spaltproduktfreisetzungs- und heterogene Temperaturberechnung) wurden bereits in Kapitel 2 erläutert. In diesem Kapitel werden die zusätzlichen Berechnungsmodule vorgestellt, die eine räumlich aufgelöste Freisetzungsrechnung erlauben. Die für diese räumlich aufgelöste Freisetzungsrechnung notwendigen Erweiterungen und neuen Ansätze sowie die zusätzlichen Funktionen des Programms werden in diesem Kapitel ausführlich vorgestellt.

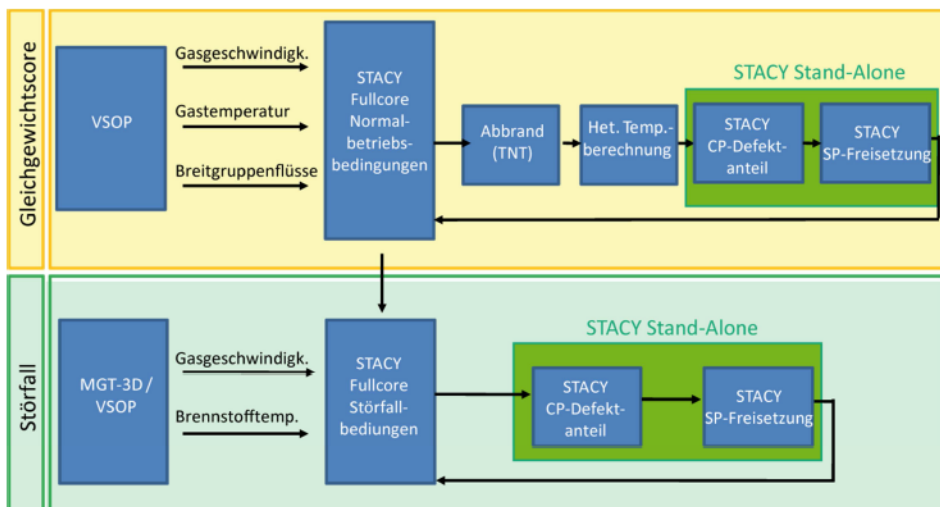


Abbildung 3.2: Datenfluss zwischen den Programmen VSOP, MGT-3D, TNT und STACY

3.2 Core-Auslegung mit VSOP

Da jede räumlich aufgelöste Spaltproduktfreisetzungssimulation mit STACY auf einer Core-Auslegung mittels VSOP aufsetzt, und dieser Vorgang der erste in der gesamten Berechnungskette ist, ist eine Kurzbeschreibung dieses Programmpakets sinnvoll. Anschließend werden die weiteren Modelle von STACY beschrieben.

Für reaktorphysikalische Untersuchungen von Hochtemperaturreaktoren wird das im Forschungszentrum Jülich entwickelte Programmpaket VSOP (Very Superior Old Programs) [RUE2012] genutzt. Obwohl vornehmlich zur Simulation von HTR eingesetzt, kann die Software prinzipiell auch zur Simulation anderer Kernkraftwerksbauarten verwendet werden. Die fluid-dynamische Rechnung (THERMIX, zweidimensional) ist transient, die neutronische Rechnung (CITATION) ist stationär und kann wahlweise als zwei- oder dreidimensionale Rechnung erfolgen. Demnach können nur Störfälle ohne Reaktivitätstransiente betrachtet werden. Die Software ermöglicht eine gekoppelte Betrachtung von Spektralrechnung, Fluidodynamik, Diffusions- und Abbrandrechnung sowie Brennstoffmanagement. VSOP wird üblicherweise zur Auslegung des Gleichgewichtscores und der Einbrennphase eines HTR genutzt.

In Abbildung 3.3 sind die in VSOP genutzten Gitter für die verschiedenen Rechnungen dargestellt. Für die fluidodynamische bzw. neutronische Rechnung wird ein kartesisches Rechengitter genutzt. Für jede Masche wird ein Material mit fluidmechanischen Eigenschaften definiert.

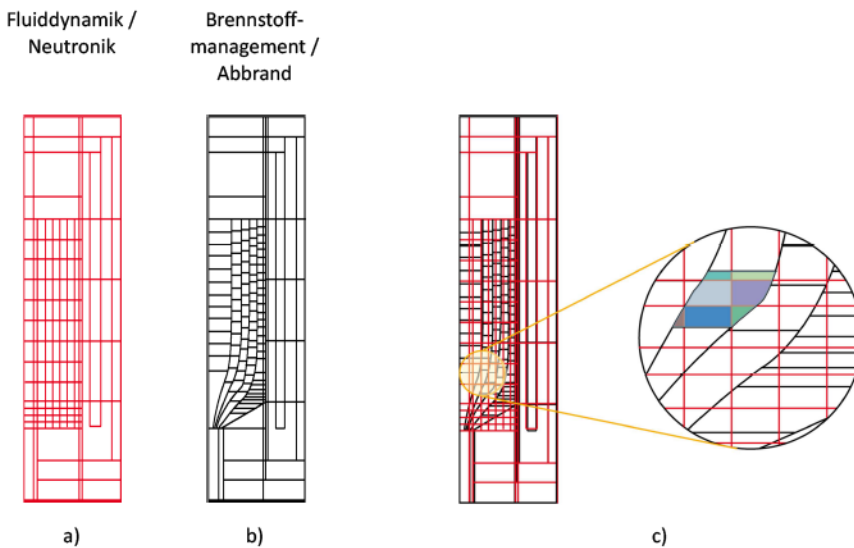


Abbildung 3.3: Rechengitter in VSOP [RUE2012]
 a) Fluidynamik (THERMIX) / Neutronik (CITATION)
 b) Brennstoffmanagement (FUMAN)
 c) Überlagerung der beiden Gittern mit Detailsicht

Vor allem bei Kugelhaufenreaktoren nimmt das Brennstoffmanagement eine zentrale Rolle ein. Ein besonderes Merkmal der Software ist die integrale Betrachtung des Brennstoffmanagements. Bei einer präzisen Modellierung des Kugelfließens, bei der die Kugelfließgeschwindigkeit nicht konstant über den Radius ist, wird das Brennstoffmanagement in einem nicht kartesischen Gitter abgebildet.

In diesem Fall wird parallel zum kartesischen Gitter ein weiteres Gitter verwendet (siehe Abbildung 3.3b). Diese Gitter sind nicht deckungsgleich, wodurch eine Transformation zwischen den beiden Gittern notwendig ist (siehe Abbildung 3.3c). Nur bei einer größeren Betrachtung des Kugelfließens bzw. bei anderen Reaktorkonzepten kann das Stromröhrenmodell mit einem kartesischen Gitter verwendet werden.

Das Kugelfließmodell in VSOP basiert auf einem Stromröhrenmodell (siehe Abbildung 3.4). Bei diesem Modell wird das gesamte Corevolumen durch Bahnkurvenrotationsflächen in rotationssymmetrische Teilvolumina unterteilt, die als Stromröhren bezeichnet werden [BED1967]. Die Stromröhren werden in VSOP als Kanal bezeichnet. Für jeden Kanal kann eine mittlere, einheitliche Kugelfließgeschwindigkeit eingestellt werden. Jeder Kanal wird axial in verschiedene „Regionen“ eingeteilt. Die Volumina aller Regionen eines Kanals sind identisch.

Nicht nur im Kugelhaufen existieren Regionen, sondern das komplette neutronisch relevante Volumen wird aus Regionen zusammengesetzt. Die Region (Spektralzone) ist ein Bereich konstanter makroskopischer Wirkungsquerschnitte. Für jede Region wird eine separate Spektralrechnung durchgeführt. Die mittlere Feststofftemperatur einer Region wird aus den maschenbasierten Feststofftemperaturen volumengewichtet gemittelt. Eine Spektralzone umfasst eine oder mehrere Abbrandzonen, die sich in Temperatur und Abbrandzustand nicht wesentlich voneinander unterscheiden.

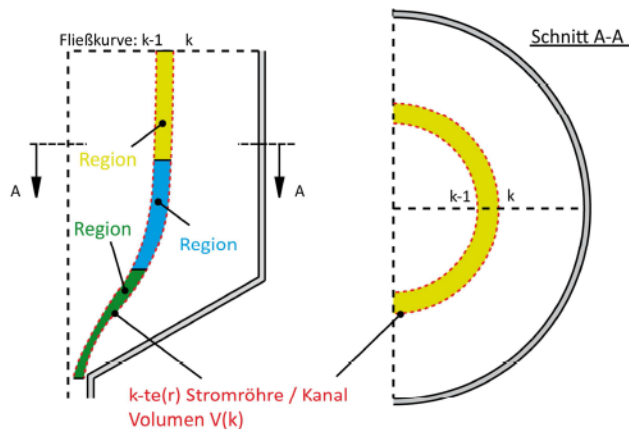


Abbildung 3.4: Schematische Darstellung zum Stromröhrenmodell [BED1967] (eigene Darstellung)

Eine Abbrandzone, in VSOP auch Batch genannt, ist ein Bereich konstanter makroskopischer Wirkungsquerschnitte. Sie ist die kleinste Volumeneinheit innerhalb des Rechenmodells. Jede Batch enthält einen individuellen Nuklidvektor, für den eine separate Abbrandrechnung durchgeführt wird. Im Modell wird davon ausgegangen, dass die Eigenschaften aller in einer Batch enthaltenen Kugeln exakt gleich sind. Diese Vorgehensweise ist eine Diskretisierung der Realität. Innerhalb einer Region des Kugelhaufens haben die verschiedenen Batches keine spezielle relative Position zueinander.

In VSOP 99/09 ist jede Region außerhalb des Kugelhaufens gleichzeitig eine eigene Abbrandzone (Batch), siehe Abbildung 3.5 (grauer Bereich). Eine Region im Kugelhaufen dagegen kann verschie-

dene Brennelementtypen oder verschiedene Abbrandzustände enthalten. Diese werden durch unterschiedliche Batches dargestellt.

Das Gleichgewichtscore des HTR-Modul beispielsweise enthält ausschließlich Brennstoffelemente eines Brennstofftyps und keine Moderatorkugeln (reine Graphitkugeln ohne Brennstoff) oder Absorberkugeln. Die Brennelemente durchlaufen das Core im Durchschnitt 15-mal und haben somit unterschiedliche Abbrandzustände. Damit diese verschiedenen Abbrandzustände erfasst werden, enthält jede Region im Kugelhaufen 15 Batches (siehe Abbildung 3.5). Somit korrespondiert die Batchnummer in diesem Fall mit der Anzahl der absolvierten Durchläufe.

In der Abbrandrechnung werden die Batches einer Region alle mit dem gleichen Neutronenfluss abgebrannt. In der VSOP-internen Abbrandberechnungsroutine werden vornehmlich neutronisch relevante Nuklide betrachtet. Für spezielle Fragestellungen kann die Rechnung um einige wenige Nuklide erweitert werden. Für die Berechnung weiterer Nuklide wird die „Lebenshistorie“ der Batches festgehalten. Mit ihrer Hilfe kann in einem nachgelagerten ORIGEN-Juel 99/09-Rechenlauf die Abbrandrechnung, unter Berücksichtigung von 1.020 Nukliden, detaillierter wiederholt werden, um z. B. Fragestellungen im Bereich der Radiotoxizität zu untersuchen.

Für die Neutronendiffusionsrechnung werden die Nukliddichten der Batches homogenisiert, d. h. auf das Gesamtvolumen der kartesischen Maschen homogen verteilt. Die Nukliddichten des aus Regionen bestehenden Gitters werden somit auf das kartesische Maschengitter abgebildet.

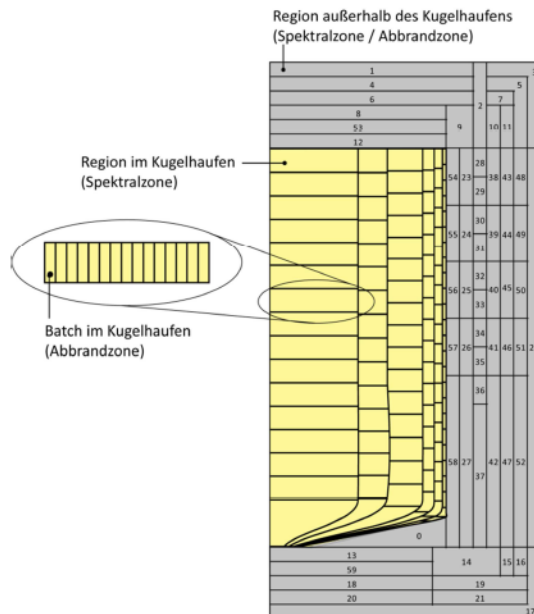


Abbildung 3.5: Definition von Regionen und Spektralzonen am Beispiel des HTR-Modul (eigene Darstellung)

Das kontinuierliche Fließen des Kugelhaufens wird durch ein diskontinuierliches Umsetzen des Brennstoffs in der Simulation berücksichtigt. Zu jedem Zeitpunkt in der Simulation, in dem ein Umladen des Brennstoffs vorgenommen wird, werden die Batches jeweils eine Region nach unten

versetzt. Batches, die sich in der untersten Region befinden, werden entladen. Üblicherweise entscheidet die Anzahl der absolvierten Durchläufe über den weiteren Verlauf einer Batch. Beim Entladen werden die Batches, falls sie einen der nominellen Durchlaufzahl entsprechenden Zielabbrand noch nicht erreicht haben, in einer „Storage Box“ zwischengespeichert, wobei Batches mit der gleichen Durchlaufzahl gemeinsam in einer Box aufgehoben werden. In dieser Box werden die Batches homogenisiert und im nächsten Brennstoffmanagementzyklus dem Core erneut zugeführt. Batches, die die nominelle Durchlaufzahl erreicht haben, werden dem System endgültig entzogen. Das Brennstoffschema vom HTR-Modul, bei dem jede Batch das Core 15-mal durchläuft, ist in Abbildung 3.6 dargestellt.

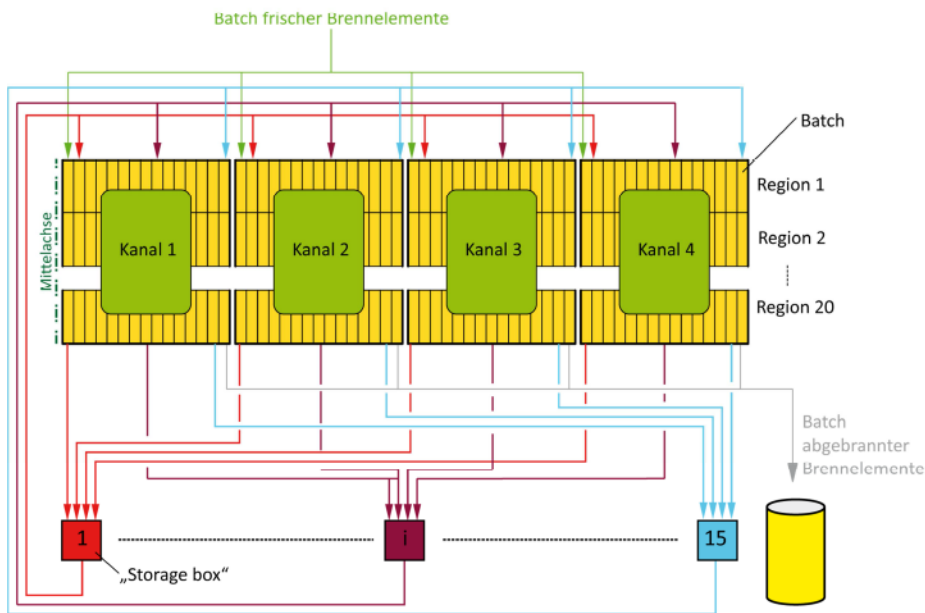


Abbildung 3.6: Schematische Darstellung des Brennstoffschemas in VSOP bei einem Reaktor mit MEDUL-Beschickung (eigene Darstellung)

Bei einem Kugelhaufenreaktor kann je nach Auslegung der Einsatz spezieller Brennelemente für die sogenannte Einbrennphase notwendig sein, um die Brennstoffspezifikationen jederzeit einhalten zu können. Die Einbrennphase ist die Zeit, in der das frische Core, auch Erstcore genannt, sukzessive in ein Gleichgewichtscore überführt wird. Die U-235-Anreicherung dieser speziellen Brennelemente ist aufgrund der entfallenden Absorption der Spaltprodukte üblicherweise deutlich geringer als die der Brennelemente des Gleichgewichtscore. Alternativ können den im Gleichgewichtscore verwendeten Brennelementen während der Einbrennphase auch reine Moderatorerkugeln beigemischt werden.

Jeder Abbrandzyklus in VSOP besteht üblicherweise aus zwei großen Abbrandzeitschritten, die ihrerseits aus zwei kleinen Abbrandzeitschritten bestehen [RUE2012]. Am Ende eines jeden großen Abbrandzeitschrittes erfolgt das Umsetzen der Batches (siehe Abbildung 3.7). Im Gleichgewichtscore, bei dem ein stetiges Hinzufügen von frischen Brennelementen und eine stetige Abfuhr von abgebrannten Brennelementen stattfindet, ist die Reaktivität konstant. Durch das diskontinuierliche Umsetzen des Brennstoffs in der Rechnung ist der Anteil der frischen Brennelemente am Anfang eines großen Abbrandzeitschrittes höher und am Ende des Zyklus niedriger, als bei einem

kontinuierlich fließenden Kugelhaufen, der fortlaufend mit Brennelementen beschickt wird. Dies spiegelt sich in dem k_{eff} -Wert wieder (siehe Abbildung 3.7). Die Spektralrechnung erfolgt jeweils nach dem ersten großen Abbrandzeitschritt, da zu diesem Zeitpunkt der mittlere Corezustand während eines Abbrandzeitschrittes am genauesten beschrieben wird.

Für das Erreichen des Gleichgewichtscore bei einer MEDUL-Betriebsstrategie ist sowohl in der Rechnung als auch in der Realität ein mehrfaches Umwälzen des kompletten Corevolumens erforderlich. Frühere Studien haben gezeigt, dass es in der Regel genügt, den Kugelhaufen insgesamt zwei Mal vollständig umzuwälzen [RUE2012]. Danach verhält sich k_{eff} stabil und es treten keine nennenswerten Schwankungen mehr auf.

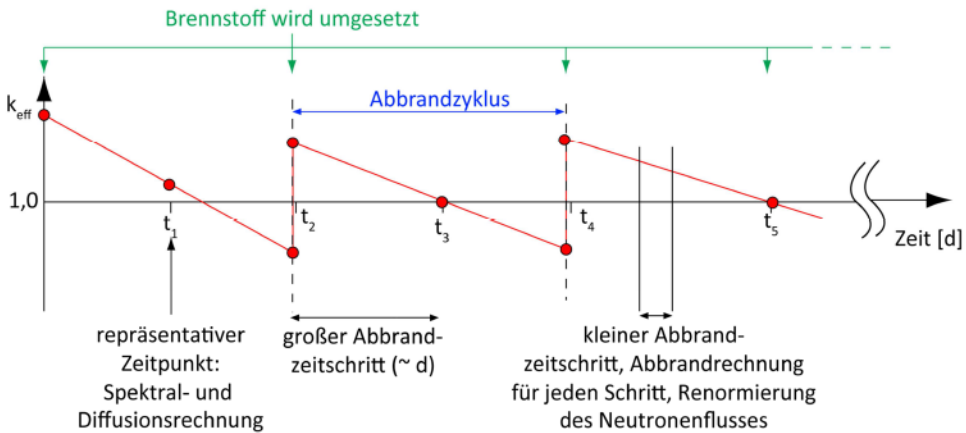


Abbildung 3.7: Verlauf von k_{eff} in Abhängigkeit von der Zeit [RUE2011] (überarbeitete Darstellung)

Im Störfall wird die Nachzerfallsleistungsberechnung in VSOP prinzipiell nach der DIN 25485 [DIN1990] berechnet. In der Norm werden die wichtigsten Beiträge zur Nachzerfallsleistung durch Näherungsformeln berechnet. Diese Berechnungsvorschrift wurde mittels ORIGIN-Rechnungen ermittelt. Dabei wurde die Vorschrift so ausgelegt, dass die anfallende Nachzerfallsleistung überschätzt wird [DIN1990]. Für die Anwendung der DIN-Norm wird die Leistungshistorie einer jeden Batch benötigt. Mit der ermittelten Leistung werden anschließend die Temperaturprofile der repräsentativen Brennelemente berechnet. Da VSOP jedoch eine detailliertere Abbrandrechnung für die Schwermetalle durchführt, liegen für diese Nuklide auch die räumlichen Inventare vor. So wird die Leistung aus dem Zerfall der Aktiniden Np-239 und U-239 und dem Aktivierungsprodukt Cs-134 direkt ermittelt, die DIN-Norm also hier durch eine genauere Berechnung ersetzt [SIE1987].

3.3 Modellierung des Brennstoffmanagements

Die Modellierung des Brennstoffmanagements nimmt eine zentrale Stellung in der gesamten Berechnungskette ein. Damit das Freisetzungsverhalten der betrachteten Tracer-Brennelemente repräsentativ für die gesamte Freisetzung aus dem Core ist, müssen auch die Positionshistorien, die durch die zurückgelegten Wege durch das Core bestimmt werden, repräsentativ sein. Der zeitliche Verlauf des Aufenthaltsorts bestimmt u.a. die aufgeprägte Temperatur und das Spaltproduktinventar eines jeden Tracer-Brennelements. Die Position der betrachteten Tracer-Brennelemente wird durch das in STACY implementierte Brennstoffmanagement bestimmt. Damit wird gewährleistet, dass die Tracer-Brennelemente zu jedem Zeitschritt stochastisch über das Core verteilt sind. Der gewählte

Ansatz in STACY basiert auf dem VSOP-Ansatz (Stromröhrenmodell), enthält jedoch wesentliche Änderungen. Zunächst wird der VSOP-Ansatz beschrieben und die Gründe für eine Modifikation dieses Modells aus Sicht der Freisetzungsberechnung aufgezeigt. Anschließend wird die in STACY benutzte Modellierung des Brennstoffmanagements vorgestellt.

3.3.1 Anwendung eines erweiterten Stromröhrenmodells in STACY

Bisheriges Stromröhrenmodell

In VSOP werden die Batches standardmäßig nach jedem Durchlauf vermischt. Die Nuklidvektoren der an dem Mischungsprozess beteiligten Batches werden hierbei aufsummiert und gleichmäßig über die Batches, die dem Core im nächsten Zeitschritt wieder zugeführt werden, aufgeteilt. Die Abbrandzustände werden also nach jedem Durchlauf homogenisiert (siehe Abbildung 3.8).

Bei jedem Durchlauf erfahren die Brennelemente im innersten Kanal jeweils die größte Zunahme des Abbrandes und im äußersten Kanal die geringste Zunahme. Obwohl die Entwicklung des Abbrandes in jedem Kanal unterschiedlich verläuft, nimmt die Spanne zwischen dem minimalen und maximalen Abbrand aufgrund der Vermischung mit zunehmender Durchlaufzahl nicht nennenswert zu (siehe Abbildung 3.8 und Anhang 10).

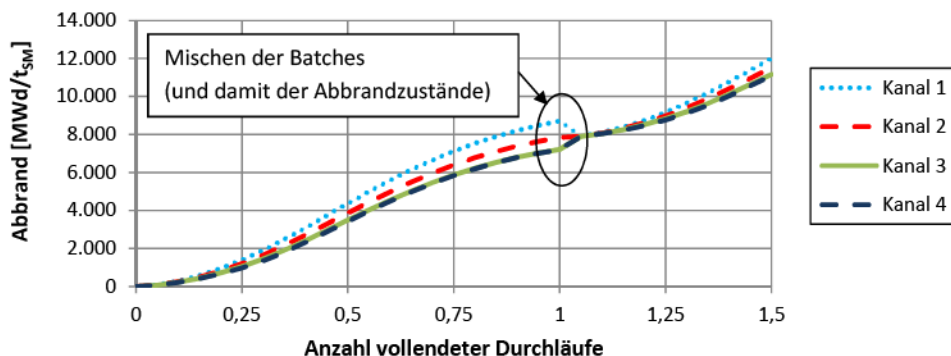


Abbildung 3.8: Auswirkung des Mischungsprozesses auf die zeitliche Entwicklung des Abbrandes am Ende eines jeden Durchlaufes am Beispiel des HTR-Modul (VSOP-Modell mit 4 Fließkanälen mit jeweils 20 Regionen)

Es werden demnach Brennelemente mit einer „gemittelten“ Lebenshistorie betrachtet. Der Zielabbrand wird bei diesen Brennelementen in allen Kanälen nach 15 Durchläufen erreicht, wie in Abbildung 3.9 exemplarisch für den ersten Kanal dargestellt ist. Diese Vorgehensweise ist im Rahmen einer Core-Auslegung ausreichend.

Größere Abweichungen werden mit dieser Vorgehensweise jedoch nicht betrachtet. In der Realität könnte ein Brennelement im Extremfall 15-mal den inneren bzw. den äußeren Kanal passieren. Aufgrund des unterschiedlichen thermischen Flusses entlang der beiden Wege wäre der Zielabbrand dann schon nach 13 bzw. erst nach 17 Durchläufen erreicht (siehe Abbildung 3.9, gepunktete Kurven).

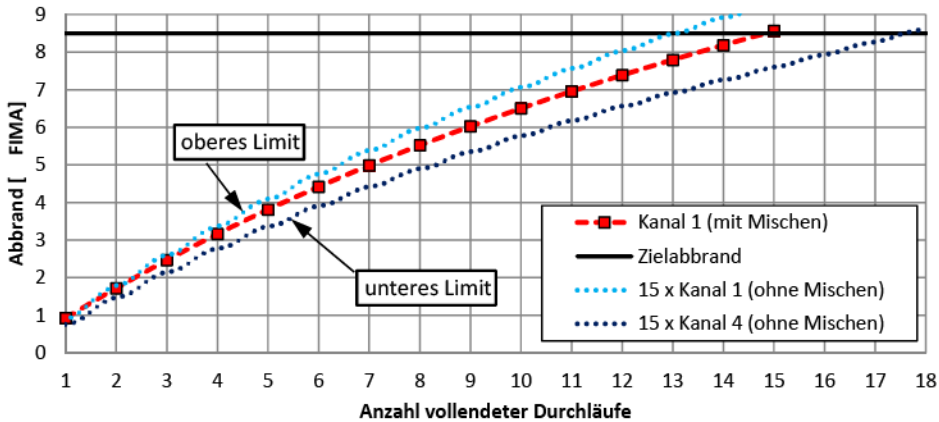


Abbildung 3.9: Entwicklung des mit VSOP ermittelten Abbrandes als Funktion der Anzahl absolvierter Durchläufe (Kanal 1: innen an der Mittelachse, Kanal 4: außen am Reflektor)

Entwicklung eines erweiterten Stromröhrenmodells

Für eine räumlich aufgelöste Freisetzungsrechnung ist allerdings die Betrachtung vieler möglicher Zustände unerlässlich. Wie eine Reihe von Publikationen gezeigt hat, müssen bei einer Best-Estimate-Betrachtung des kompletten Reaktorcores auch Sonderfälle in der Freisetzungssimulation berücksichtigt werden. Falls man die Vorgehensweise des VSOP-Brennstoffmanagements, bei der die Eigenschaften der Batches nach jedem Durchlauf vermischt werden, auf die Berechnung von Partikelbruchanteil und Spaltproduktfreisetzungsraten übertragen würde, würden Eigenschaften der einzelnen Batches, wie z. B. Spaltproduktkonzentrationsprofile und die Anzahl an Defektpartikel, durch den Mischvorgang verloren gehen. Dieser Informationsverlust würde sich dann auch auf den zeitlichen Verlauf von z. B. Freisetzungsraten auswirken. Demnach ist diese Vorgehensweise aus VSOP nicht auf die Freisetzungsrechnung anwendbar. Die Einzelbetrachtung aller Brennelemente ist aufgrund der großen Anzahl in einem Versuchs- oder gar Leistungsreaktor innerhalb vertretbarer Rechenzeiten nicht möglich. Andererseits nimmt die Qualität der Rechenergebnisse ab einer bestimmten Anzahl an Tracer-Brennelementen nicht weiter zu, wie später gezeigt wird.

Für die Freisetzungsrechnung werden zufallsbasiert Tracer-Brennelemente zugegeben, die entlang der vorgegebenen Fließlinien ihren Weg durch das Reaktorcore antreten. Bei rotations-symmetrischen Cores ist der weitere Weg einer Kugel aufgrund des laminaren Strömungsverhaltens lediglich durch seine radiale Anfangslage auf der Brennelementschüttungsfläche festgelegt. Demnach müssen nur die radialen Anfangspositionen vorgegeben werden, die mit Hilfe eines Zufallsgenerators bestimmt werden.

Bei der Entnahme eines Brennelements aus dem Core wird in der Simulation, vergleichbar mit der Realität, überprüft, ob der Zielabbrand erreicht wurde. Falls dies nicht der Fall ist, wird das Brennelement dem Reaktorcore wieder zugeführt, wobei wiederum eine neue radiale Anfangslage zufallsbasiert bestimmt wird. Während eines Brennstoffmanagementschrittes legt das Brennelement den Weg von der Oberkante bis zur Unterkante der jeweiligen Region zurück. Die makroskopischen Werte, wie z. B. Neutronenflüsse und Daten aus den fluiddynamischen Rechnungen, werden im Falle

des Normalbetriebs der VSOP-Ausgabe entnommen. Für Störfallrechnungen werden diese Eingangsdaten der VSOP- oder MGT-3D-Ausgabe entnommen.

Aufgrund der Tatsache, dass VSOP-Ergebnisse lediglich mittels I/O-Kopplung für die Spaltproduktfreisetzungsrechnung hätten genutzt werden können, wurde das auf dem Stromröhrenmodell basierende Kugelfließmodell in STACY neu implementiert. Im Gegensatz zu den in VSOP genutzten Batches haben die zu einer Region gehörenden Brennelemente in der STACY-Rechnung innerhalb der Region eine exakte radiale und axiale Position (siehe Abbildung 3.10).

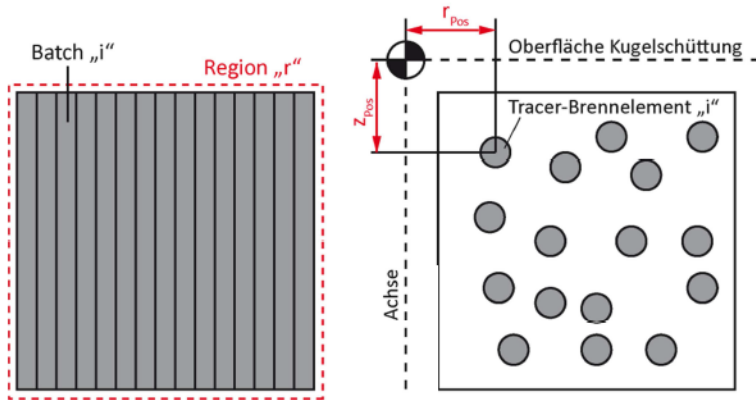


Abbildung 3.10: Definition der Batches im Stromröhrenmodell von VSOP (links) und Tracer-Brennelemente im erweiterten Stromröhrenmodell von STACY (rechts)

Der Zufallszahlengenerator liefert Zahlen zwischen Null und Eins. Falls der vom Benutzer vorzugebende Anfangswert zur Generierung der Pseudo-Zufallsreihe stets identisch ist, liefert er immer die gleiche Zahlenfolge. Die Spanne zwischen Null und Eins wird in ebenso viele Intervalle unterteilt, wie Kanäle in dem VSOP-Modell vorgesehen sind. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Brennelement bei der Wiederzufuhr in Kanal „k“ mündet, hängt vom Volumen einer Region des Kanals „k“ im Verhältnis zur Summe der Volumina aller anderen Regionen ab (siehe Abbildung 3.11a). Diese Vorgehensweise gewährleistet den Massenerhalt im Core während eines Zeitschrittes des Brennstoffmanagements. Die Breiten der Intervalle berechnen sich demnach gemäß folgender Gleichung:

$$p_k = \frac{V_{Reg,Ch,k}}{\sum_{i=1}^{n_{Ch}} V_{Reg,Ch,i}} \quad 3.1$$

mit: $V_{Reg,Ch,i}$ - Volumen einer Region in Kanal „i“ [m³]

Die Unter- bzw. Obergrenze des k-ten Intervalls werden durch folgende Gleichungen festgelegt:

$$p_{Min,k} = \sum_{i=1}^{k-1} p_i, \quad p_{Max,k} = p_{Min,k} + p_k \quad 3.2$$

Liegt der mittels Zufallsgenerator bestimmte Wert zwischen $p_{Min,k}$ und $p_{Max,k}$, so mündet das Tracer-Brennelement in Kanal „k“ (siehe Abbildung 3.11b). Darüber hinaus wird im Gegensatz zu VSOP eine radiale Anfangsposition innerhalb der Region „r₀“ berechnet (siehe Abbildung 3.11b), mit der die gesamte Laufbahn des Brennelements für den Durchlauf festgelegt ist.

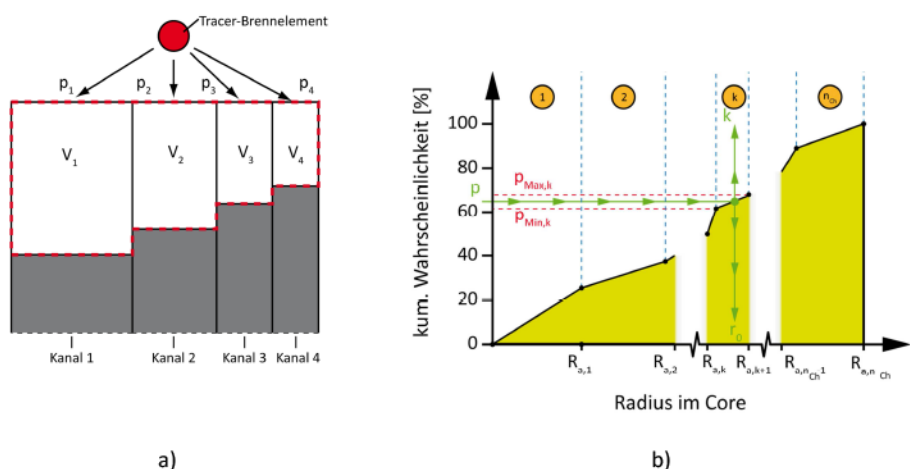


Abbildung 3.11: a) Volumenverhältnisse der Regionen eines jeden Kanals zur Berechnung der Wahrscheinlichkeiten bei der Zugabe von Tracer-Brennelementen (Beispiel mit vier Kanälen)
b) Kumulative Wahrscheinlichkeit bei der Zugabe von Tracer-Brennelementen

Innerhalb eines Zeitschritts des Brennstoffmanagements wird der Inhalt jeder Region in die daruntergelegene Region verschoben. Damit der Füllstand des Reaktorcores unverändert bleibt, muss die oberste Region eines jeden Kanals aufgefüllt werden. Diese Vorgehensweise soll am Beispiel des HTR-Modul-Modells mit Fließkanälen illustriert werden (siehe Tabelle 3.1). Aus den sechs Volumenverhältnissen lassen sich die kumulativen Anteile berechnen, die in diesem Fall mit Wahrscheinlichkeiten gleichzusetzen sind. Liefert der Zufallsgenerator im konkreten Zahlenbeispiel eine Zahl zwischen 0,472 und 0,778, so wird das Tracer-Brennelement in den dritten Kanal umgesetzt.

Tabelle 3.1: Geometrische Verhältnisse und daraus abgeleitete Größen des HTR-Modul zur Bestimmung der Kanaluweisung bei der Brennelementzuführung

Kanal	Innenradius an der Oberfläche	Außenradius an der Oberfläche	Volumen einer Region des Kanals	Anteil am zugeführten BE-Volumen pro Zeitschritt	Kumulativer Anteil	Minimalwert des Zufallsgenerators	Maximalwert des Zufallsgenerators
	[m]	[m]	[m ³]	[]	[]	[-]	[-]
1	0,0	0,75	1,06	26,4	26,4	0,0	0,264
2	0,75	1,00	0,83	20,8	47,2	0,264	0,472
3	1,00	1,30	1,22	30,6	77,8	0,472	0,778
4	1,30	1,40	0,46	11,6	89,3	0,778	0,893
5	1,40	1,47	0,32	7,9	97,2	0,893	0,972
6	1,47	1,50	0,11	2,8	100,0	0,972	1,000

Als Teil von STACY hat das Brennstoffmanagement die Aufgabe, ein Gleichgewichtscore herzustellen, bei dem die Tracer-Brennelemente repräsentativ über das Core verteilt sind. Im Brennstoffmanagement wird dazu folgende Strategie verfolgt. In Abbildung 3.12 ist der zeitliche Ablauf des Brennstoffmanagements dargestellt. Am Anfang der Rechnung sind keine Tracer-Brennelemente im Core vorhanden. Falls die gewünschte Gesamtanzahl an Tracer-Brennelementen von Anfang an im Core vorhanden ist, werden hierdurch nur die Rechenergebnisse während der Anfangsphase beeinflusst. Diese Anfangsphase entspricht keiner Einbrennphase, da von Anfang an Temperatur- und Neutronenflussverteilungen des Gleichgewichtscore als Eingabe genutzt werden. Die berechnete Gesamtfreisetzungsrates repräsentiert die Freisetzung der Brennelemente im Core somit nicht. Die Tracer-Brennelemente beeinflussen auch die Freisetzungsrates des Gleichgewichtscore nicht, da sie schon längst ausgewälzt sind, sobald das Gleichgewichtscore erreicht wird. Die Betrachtung dieser Brennelemente würde demnach nur Rechenzeit kosten. Die gewählte Strategie ist somit schneller und erzielt die gleichen Ergebnisse.

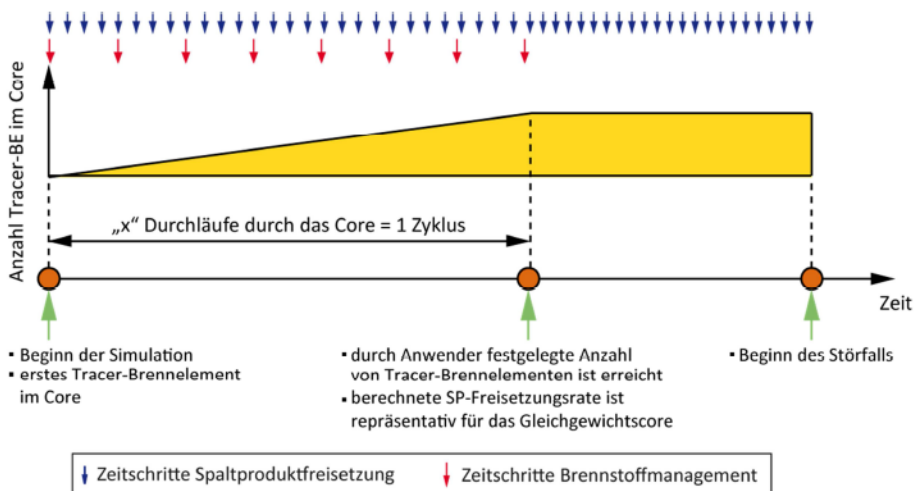


Abbildung 3.12: Zeitachse des Brennstoffmanagements in STACY

Damit eine gleichmäßige räumliche Verteilung von Tracer-Brennelementen im Core vorliegt, werden frische Tracer-Brennelemente über die gesamte Rechnung mit einer konstanten Zufuhr rate eingewälzt. Diese Zufuhr rate muss so gewählt werden, dass die statistisch notwendige Gesamtanzahl an Tracer-Brennelementen im Core erreicht ist, bevor das erste Brennelement endgültig entladen wird. Sobald das erste Tracer-Brennelement seinen Zielabbrand erreicht hat, wird es endgültig entladen. Ab diesem Zeitpunkt entspricht die Anzahl an endgültig entladenen Tracer-Brennelementen der Anzahl frisch hinzugeführter Tracer-Brennelemente. Falls die gewünschte Gesamtanzahl an Tracer-Brennelementen bis zu diesem Zeitpunkt noch nicht erreicht ist, wird sie somit auch nicht zu einem späteren Zeitpunkt erreicht.

Diese mittlere Rate ist in der Regel keine natürliche Zahl. Da allerdings in STACY eine ganzzahlige Anzahl Tracer-Brennelemente betrachtet werden, werden dem Core nur ganze Brennelemente zugeführt. Der Sollwert der bis dahin zugegebenen Brennelemente wird demnach auf eine ganze Zahl gerundet. Exemplarisch sind in Abbildung 3.13 die Zufuhr rate und der Restwert für eine bestimmte Zufuhr rate (3,564 Brennelemente / Zeitschritt) dargestellt.

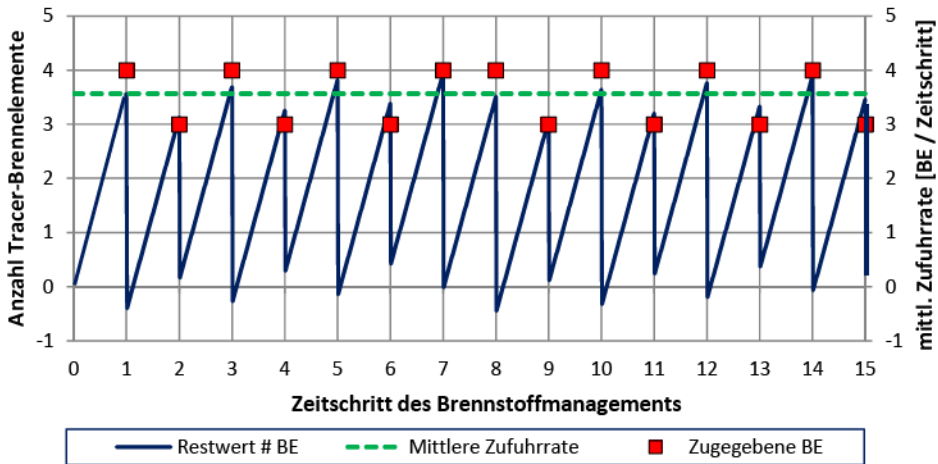


Abbildung 3.13: Zufuhr rate der Brennelemente und Restwert über der Zeit
(mittlere Zufuhr rate = 3,564 BE / Zeitschritt)

Man erkennt, dass der Restwert am Anfang eines Zeitschritts um die zugegebene Anzahl der Brennelemente sinkt. Danach steigt der Restwert linear bis zum nächsten Zeitschrittsende an. Durch diesen Ansatz wird sichergestellt, dass auf der einen Seite die erforderliche Zufuhr rate im zeitlichen Durchschnitt erreicht wird und auf der anderen Seite nur „vollständige“ Tracer-Brennelemente dem Core zugegeben werden.

In Abbildung 3.12 ist die Interaktion mit den anderen Rechenmodulen dargestellt. In jedem Schritt werden für jedes Brennelement der Bruchanteil, ein aktuelles Brennelementtemperaturprofil sowie die Freisetzungsr ate berechnet. Dies erfolgt üblicherweise mit einer höheren zeitlichen Auflösung als das Brennstoffmanagement. Dabei wird programmintern dafür gesorgt, dass die Zeitschrittweite des Brennstoffmanagements ein ganzzahliges Vielfaches der anderen Zeitschrittweiten ist. In der Regel liegt die Zeitschrittweite des Brennstoffmanagements, bedingt durch die übliche Einteilung der Regionen, in der Größenordnung einiger Tage.

Verifikation des erweiterten Stromröhrenmodells

Das vorher beschriebene erweiterte Stromröhrenmodell wird in diesem Abschnitt verifiziert, um eine korrekte Verteilung aller Tracer-Brennelemente im Laufe der Rechnung zu gewährleisten. Nur dann sind die nachher berechneten Freisetzungsr aten der betrachteten Tracer-Brennelemente repräsentativ für das gesamte Core. Hierzu werden verschiedene Indikatoren betrachtet, die unabhängig voneinander die Richtigkeit des erweiterten Stromröhrenmodells belegen. Ein erster Indikator für eine korrekte räumliche Verteilung ist die nach der Durchlaufzahl sortierte Brennelementverteilung. In Abbildung 3.14 ist diese Verteilung für eine zufällig ausgewählte Region dargestellt.

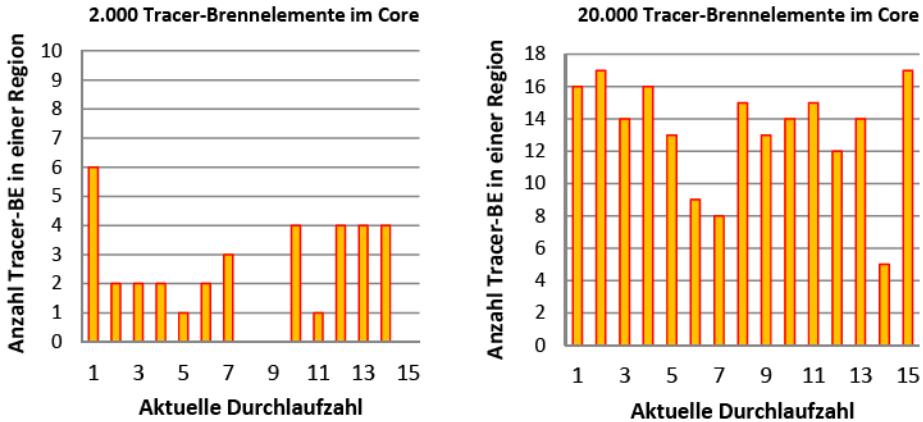


Abbildung 3.14: Verteilung der absolvierten Durchläufe in einer zufällig gewählten Region bei einer Gesamtanzahl von 2.000 und 20.000 Tracer-Brennelementen im Core

Bei einer Gesamtanzahl von 2.000 Tracer-Brennelementen sind in der gewählten Region z. B. keine Brennelemente vorhanden, die sich im 8., 9. oder 15. Durchlauf befinden. Im Gegensatz dazu sind Brennelemente, die sich im ersten Durchlauf befinden, überrepräsentiert. Würden alle Brennelemente als gleichwertig angesehen, wie es bei der Mittelung der Fall ist, hätte die Verteilung bei der Hochskalierung der Freisetzungsrates der Tracer-Brennelemente einen Einfluss auf die Gesamtfreisetzungsrates der Region. Wie die Abbildung zeigt, stellen sich erst bei einer höheren Gesamtanzahl von Tracer-Brennelementen gleichmäßige Verhältnisse ein. Gleichwohl sind auch bei höheren Anzahlen geringe Ungleichmäßigkeiten vorhanden. Bei der Bestimmung der Gesamtfreisetzungsrates des Cores können diese Ungleichmäßigkeiten durch die Berechnung einer mittleren Freisetzungsrates jeder Durchlaufzahlgruppe und der anschließenden Gewichtung ausgeglichen werden. Dieser Mechanismus wird in Abschnitt 3.5 näher beleuchtet.

Ein zweiter Indikator für eine korrekte räumliche Verteilung der Brennelemente ist die Verteilung der Gesamtweglängen. Dazu wurden einmalig für den HTR-Modul (Modell mit präziser Beschreibung des Kugelfließens) alle möglichen Gesamtweglängen mit der jeweiligen Häufigkeit berechnet. Bei einem Reaktormodell hängt die Gesamtweglänge eines Brennelements von den durchlaufenen Fließkanälen bei den unterschiedlichen Durchläufen ab. Ein Beispiel einer solchen Reihe von „Kanal-IDs“ bei einem Modell mit 4 Kanälen und 15 Durchläufen wäre z. B. 15-mal Kanal 1 (höchst unwahrscheinlich). Insgesamt existieren bei n_{Ch} Kanälen

$$n_{Wege} = (n_{Ch})^{n_{Durchlauf}} \quad 3.3$$

mit $n_{Durchlauf}$ - Gesamtanzahl Durchläufe

unterschiedliche Wege, um „ $n_{Durchlauf}$ “-mal das Core zu durchlaufen, falls die Reihenfolge der durchquerten Kanäle berücksichtigt wird. Bei einem Modell mit vier Kanälen und 15 Durchläufen existieren 4^{15} Gesamtwege.

Bei einer durch die relativen Volumina der Regionen festgelegten Wahrscheinlichkeitsverteilung kann die Gesamtweglänge eines jeden Wegs (ausgedrückt in Anzahl durchquerter Regionen) durch eine

Summation der Anzahl Regionen von jedem durchflossenen Kanal bestimmt werden. Somit kann die j-te mögliche Gesamtweglänge " $n_{\text{Reg,ges},j}$ " nach folgender Gleichung berechnet werden:

$$n_{\text{Reg,ges},j} = \sum_{i=1}^{n_{\text{Durchlauf}}} n_{\text{Reg},j,i} \quad 3.4$$

mit: $n_{\text{Reg},j,i}$ - Anzahl durchquerter Regionen beim i-ten Durchlauf des j-ten Gesamtweges

Falls Kanal 1 in diesem Beispiel 16 Regionen enthält, entspricht die Gesamtlänge im oben genannten Beispiel 240 Regionen. Analog folgt für die dazugehörige Wahrscheinlichkeit, dass die Fließkanäle in genau dieser Reihenfolge durchlaufen werden:

$$p_j = \prod_{i=1}^{n_{\text{Durchlauf}}} p_{\text{Ch},j,i} \quad 3.5$$

mit: $p_{\text{Ch},j,i}$ - Wahrscheinlichkeit, dass das Brennelement im i-ten Durchlauf des j-ten Gesamtweges in den jeweiligen Kanal mündet

Ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Brennelement bei Zufuhr in Kanal 1 gelangt gleich 26,4 %, so ist die Wahrscheinlichkeit des oben genannten Gesamtweges (15 x Kanal 1) gleich $2,1 \cdot 10^{-7}$. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Gesamtweglängen ergibt sich durch das Aufsummieren der individuellen Wahrscheinlichkeiten aller Gesamtwege mit der gleichen Gesamtweglänge.

In Abbildung 3.15 sind die Weglängen nach diesem analytischen Verfahren gemeinsam mit dem zufallsbasierten Ergebnis von 4.500 Brennelementen einer STACY-Rechnung am Beispiel eines HTR-Modul mit präziser Beschreibung des Kugelfließens, bei dem jeder Kanal eine individuelle Regionenzahl und Wahrscheinlichkeit hat, dargestellt.

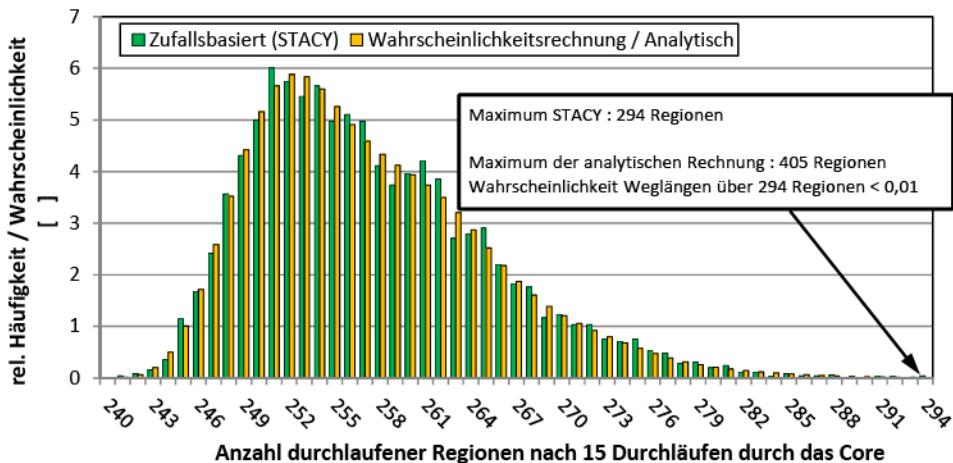


Abbildung 3.15: Verteilung der Weglängen (in Anzahl durchlaufener Regionen) nach 15 Durchläufen (Simulationsmodell mit 6 Kanälen, 16 / 16 / 17 / 18 / 20 / 27 Regionen, Wahrscheinlichkeiten gleich 26,40 % ; 20,80 % ; 30,56 % ; 11,56 % ; 7,87 % ; 2,79 %)

Damit eine analytische Lösung angegeben werden kann, wird an dieser Stelle vereinfachend davon ausgegangen, dass jedes Brennelement 15-mal umgewälzt wird. Man sieht, dass die Übereinstimmung der zufallsbasierten Wege mit den Erwartungswerten sehr groß ist. Nur am oberen Ende der Verteilung (Weglängen äußerst geringer Eintrittswahrscheinlichkeit) gibt es eine Differenz zwischen beiden Verteilungen. Diese lässt sich durch die sehr geringe Eintrittswahrscheinlichkeit in Verbindung mit der begrenzten Anzahl an Tracer-Brennelementen erklären. Weglängen über 294 Regionen haben eine Eintrittswahrscheinlichkeit von kleiner 0,01, die mit zunehmender Länge des Weges sehr schnell noch weiter abnimmt. Des Weiteren hat eine dritte Analyse, bei der die Kugeldichten pro Masche verglichen werden, gezeigt, dass die Tracer-Brennelemente gleichmäßig über das Core verteilt vorliegen. Es konnte gezeigt werden, dass die durch den Zufallsgenerator generierten Fließbahnen und somit fixierten Historien für das gesamte Core repräsentativ sind.

3.3.2 Entwicklung eines neuen Kugelfließmodells

Bei einer Gesamtbetrachtung aller relevanten Prozesse nimmt die korrekte Beschreibung des Kugelfließens beim Kugelhaufenreaktor eine zentrale Rolle ein. Bei den Arbeiten mit VSOP hat sich allerdings herausgestellt, dass das in VSOP genutzte Modell zur Beschreibung des Kugelfließens wie es für STACY benötigt wird Defizite aufweist. Zur Beseitigung ein Teil dieser Defizite wurde das in Abschnitt 3.3.1 dargestellte Modell entwickelt. Im Rahmen der HCP-Entwicklung wird allerdings ein anderes Modell benötigt, was zu der Entwicklung eines komplett neuen Kugelfließmodells geführt hat. Zuerst werden die Einschränkungen des VSOP-Kugelfließmodells und anderer Modelle aufgezeigt. Im zweiten Teil wird ausgehend von den experimentellen Erkenntnissen ein neues Modell entwickelt. Abschließend wird das Modell beispielhaft mit experimentellen Daten verglichen.

Einschränkungen bestehender Modelle

Das Stromröhrenmodell als Teil von VSOP (siehe Abschnitt 3.2) besitzt eine Reihe von Limitierungen, die in diesem Abschnitt erläutert werden. Aus diesen Einschränkungen werden anschließend die Entwicklungsziele für das neue Modell abgeleitet.

Beim Stromröhrenmodell wird angenommen, dass die Kugeln innerhalb eines Kanals mit einheitlicher Geschwindigkeit fließen. Somit ist es nicht möglich, lokale Zonen mit verringerter Geschwindigkeit abzubilden. Diese Zone verringerter Geschwindigkeit ist vor allem im Übergangsbereich zwischen dem zylindrischen Teil des Cores und dem Abzugstrichter sehr stark ausgeprägt und nicht über die gesamte Höhe des Reflektors gleich stark (siehe Anhang 11).

Bei einem HTR mit einem zentralen Zugaberohr gibt es nur einen zentralen Schüttkegel. Bei Reaktoren mit dezentralen Zuführrohren (Satelliten) gibt es mehrere Schüttkegel. Der Schüttkegel des Kugelhaufens kann aufgrund der Einschränkung, dass der Hohlraum nur als Zylinder abgebildet werden kann, nicht detailgetreu dargestellt werden. Der Kugelhaufen wird deshalb in VSOP durch eine effektive mittlere Höhe abgebildet, wobei das Gesamtvolumen dem realen Gesamtvolumen entspricht. Beim AVR, der im Gegensatz zu modernen HTR-Konzepten von unten nach oben durchströmt wurde, befindet sich die maximale Brennstofftemperatur nahe der Kugelhaufenoberfläche. Demnach ist eine detailliertere Beschreibung der Schüttkegel bei solchen Reaktoren unerlässlich. Bei THERMIX-3D-Rechnungen wurden die Schüttkegel stufenförmig aufgelöst. Aufgrund der verschiedenen Zugaberohre gibt es einen zentralen und vier dezentrale Schüttkegel. In Abbildung 3.16 ist die errechnete Temperaturverteilung an der Oberfläche des AVR dargestellt.

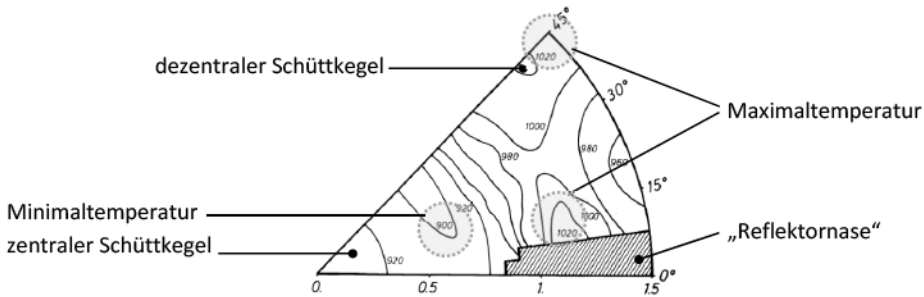


Abbildung 3.16: Berechnete Brennstofftemperaturverteilung in Grad Celsius an der Kugelschüttungsoberfläche im AVR [VER1984]

Aufgrund der Symmetrie ist lediglich ein 45°-Ausschnitt dargestellt. Für das Kühlmittel Helium ist der Strömungswiderstand in der Kugelschüttung naturgemäß größer als in einem Hohlraum. Durch die geringere effektive Strömungsweglänge in einem „Tal“ im Vergleich zum maximalen, an der Spitze des Schüttkegels vorliegenden Weg, ist der Strömungswiderstand des ersten Weges geringer. Deshalb strömt das Kühlgas bevorzugt durch die „Täler“ zwischen den Schüttkegeln aus der Kugelschüttung, das somit kühler bleibt als das Kühlgas, das beim Durchströmen des Schüttkegels noch weiter aufgeheizt wird. Dies führt zu Temperaturdifferenzen von über 100°C. Gerade bei einem von unten nach oben durchströmten Reaktor wie dem AVR ist es daher sinnvoll, dies zu erfassen [VER1984].

Neben den genannten physikalischen gibt es auch softwaretechnische Gründe, die für einen neuen Ansatz beim Kugelfließen sprechen. Das auf dem Stromröhrenmodell basierende Brennstoffmanagementmodell benötigt ein zusätzliches Rechengitter neben dem kartesischen Gitter, das zur Beschreibung der Fluidodynamik und Neutronik benutzt wird. Dadurch ist es notwendig, Daten zwischen beiden Gittern hin- und her zu transferieren. Im Hinblick auf das Datenmodell des HCP, in dem das (eine) Maschengitter zentraler Ort des Datenaustausches zwischen den einzelnen Rechenmodulen ist, wäre die Beibehaltung verschiedener Gitter mit weitergehenden Problemen behaftet.

Andere Ansätze, wie z. B. die „Diskrete Elemente Methode“ (DEM), beschreiben die Bewegung einzelner Kugeln durch die Bilanzierung der auf jede Kugel wirkenden Kräfte. Das Programm PFC^{3D} [ITA2012] basiert z. B. auf diese Methode. Dieses Programm wurde erfolgreich in Studien des Kugelfließens im AVR und PBMR-400 eingesetzt [NIE2006, NIE2009]. Die Messergebnisse am AVR konnten mit dem Programm reproduziert werden [NIE2006]. Diese Ansätze bieten zwar eine hohe räumliche Auflösung, sind allerdings derzeit noch zu zeitintensiv für eine integrale multi-physikalische Simulation, wie sie mit dem HCP angestrebt wird. In einem anderen Modell wurde versucht, die Bewegung des Kugelhaufens mit einer Flüssigkeit abzubilden [SCH1989c]. Dieses Modell konnte die Versuchsergebnisse aber nicht reproduzieren. Somit besteht die Notwendigkeit, ein neues Modell zu entwickeln, welches die bestehenden Limitierungen aufhebt und gleichzeitig die Anforderungen des HCP erfüllt [XHO2012a].

Evaluierung vorhandener Versuche

Zur Entwicklung eines neuen Kugelfließmodells werden die in den Experimenten gewonnen Erkenntnisse herangezogen. Aus diesem Grund werden die wichtigsten experimentellen Erkenntnisse an dieser Stelle zusammengefasst.

Eine verlässliche Vorhersage des Kugelfließverhaltens ist für den Betrieb eines Kugelhaufenreaktors unerlässlich. Aus diesem Grund wurden in der Vergangenheit viele Experimente durchgeführt, bei denen das Fließverhalten von Kugelschüttungen, auch speziell für die Anwendung in Hochtemperaturreaktoren, untersucht wurde [BED1966, BED1971, TIN1973, GAT1977, BAB1992, KAD2004]. Diese Experimente lassen sich grob in zwei Gruppen einteilen. Einige Prüfstände waren optisch durchsichtig, was erlaubte, dass Trajektorien einzelner Kugeln nachvollzogen werden konnten (siehe Abbildung 3.17a). Die optische Zugänglichkeit bei gleichzeitiger Verwendung der Originalgeometrie erfordert ein umgebendes Fluid mit einem geeigneten Brechungsindex. Bei anderen Prüfständen wurde die dreidimensionale Geometrie halbiert (siehe Abbildung 3.17b).

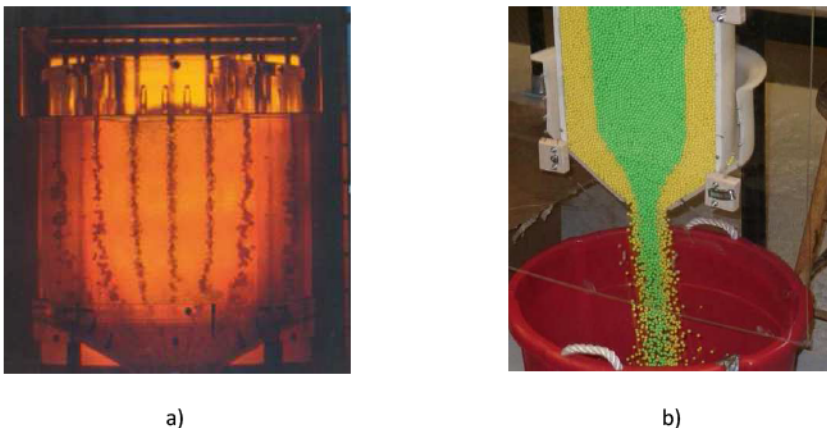


Abbildung 3.17: Prüfstände zur Untersuchung des Kugelfließverhaltens [BED1971]
 a) Prüfstand mit Kugeln aus Glas
 b) Halbierte dreidimensionale Geometrie einer Kugelschüttung mit Kugeln aus Kunststoff [KAD2004]

Bei diesen Anlagen kann mit geringem Aufwand die Fließkurve einzelner Kugeln registriert werden. Allerdings ist die Geometrie, und damit unter Umständen das Kugelfließverhalten, beeinträchtigt. Bei einigen Versuchsständen, bei denen die Kugeln und die Innenseite des Behältnisses aus dem tatsächlich genutzten graphitischen Werkstoff hergestellt wurden und die reale Reaktorgeometrie maßstabsgetreu abgebildet wurde, konnten mit Hilfe kurzlebiger Radionuklide die Laufbahnen einzelner Kugeln erfasst werden [GAT1977]. Generell haben die Experimente gezeigt, dass mit zunehmendem Verhältnis von Höhe zu Durchmesser der Kugelschüttung die Brennelemente gleichmäßiger durch das Core laufen [TIN1973].

Die Versuche wurden in unterschiedlichen Umgebungsmedien durchgeführt. Zum Teil wurden die Versuche in Luftatmosphäre, zum Teil in einer Heliumatmosphäre durchgeführt. Dabei hat der Reinheitsgrad des Betriebsmediums einen wesentlichen Einfluss auf das Reibungsverhalten und damit auf das Kugelfließverhalten [XIA2010]. Allen Experimenten ist gemein, dass sie bei

Umgebungstemperatur durchgeführt wurden. Weitere Experimente (z. B. [KAD2004]) haben bestätigt, dass nur eine marginale Dispersion der Kugeln zwischen benachbarten Fließpfaden stattfindet. Die Kugeln verhalten sich makroskopisch wie die laminare Strömung einer Flüssigkeit, wobei die reflektornahen Kugeln aufgrund der Wechselwirkung mit der Reflektorwand langsamer fließen. Die mittleren Trajektorien werden durch zufallsbasierte Abweichungen überlagert (siehe Abbildung 3.18). Somit lässt sich bei vorgegebener Anfangsposition einer Kugel die Trajektorie einer Kugel im Core mit einer bestimmten Bandbreite vorhersagen. Auch wenn die Laufbahn einer einzelnen Kugel nicht exakt vorherbestimmbar ist, lässt sich der mögliche Weg mit einer hohen Wahrscheinlichkeit eingrenzen. Wie Abbildung 3.18 zeigt, kann in einem rotationssymmetrischen Core für jede bestimmte radiale Anfangslage ein mittlerer Weg durch das Core bestimmt werden, die sogenannte mittlere Fließkurve. Die Abweichung einer Kugel vom mittleren Pfad beschränkt sich nach Durchlaufen des Cores maximal auf wenige Kugeldurchmesser [KAD2004, YAN2009].

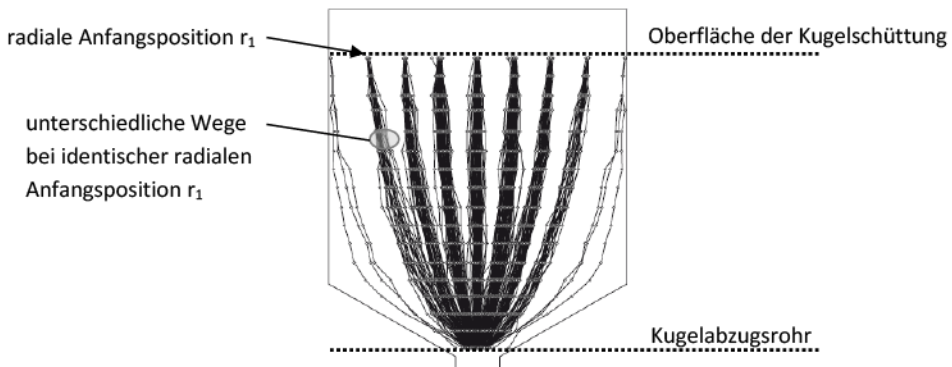


Abbildung 3.18: Gemessene Fließkurven einzelner Kugeln bei gleicher radialer Anfangsposition (rotationssymmetrisches Core) [YAN2009]

Das Kugelfließmodell SHUFLE

Im Rahmen der HCP-Entwicklung hat sich herausgestellt, dass das in VSOP integrierte Modell zur Beschreibung der Brennelementumwälzvorgänge im Falle eines Kugelhaufens nicht ohne erheblichen Aufwand hinsichtlich neuer Anforderungen, wie z. B. dreidimensionales Kugelfließen, erweitert werden kann. Folglich wird versucht, das Kugelfließen im HCP durch einen anderen Ansatz zu beschreiben. Das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Rechenmodell Software for Handling Universal Fuel Elements (*SHUFLE*) soll eine höhere Auflösung im Vergleich zum Stromröhrenmodell bieten, ohne die Simulationszeit unverhältnismäßig zu erhöhen. Damit wird die Integration in einen multi-physikalischen Systemcode wie das HCP ermöglicht.

Hauptaufgabe dieses neuen Rechenmodells ist es, die Bewegung des Kugelhaufens ohne die Verwendung eines separaten Gitters abzubilden und damit eine integrale Betrachtung von Kugelfließen, Fluidodynamik und Neutronendynamik zu ermöglichen. Das Modell hat genau wie das Stromröhrenmodell keine Vorhersagekraft, da zu seiner Anwendung Ergebnisse von Versuchen oder detaillierten Simulationen (z. B. *DEM*) notwendig sind.

Das Pflichtenheft von SHUFLE umfasst folgende (neue) Anforderungen:

- Das Modell soll **maschenspezifische Füllfaktoren** berücksichtigen können. Der Füllfaktor ist hauptsächlich eine Funktion der vertikalen und radialen Position im Kugelhaufen. Vor allem in wandnahen Bereichen werden Randeffekte infolge der höheren Volumenanteile beobachtet [SIE1987]. Die Berücksichtigung eines maschenspezifischen Füllfaktors macht es möglich, Fälle zu untersuchen, bei denen (unerwünschte) Anhäufungen von Brennelementen unterstellt werden. Des Weiteren kann mit dieser Funktionalität auch eine Verdichtung des Kugelhaufens, bedingt durch seismische Vorgänge, untersucht werden.
- Eine **präzisere Beschreibung** der Kugelschüttungsoberfläche soll ermöglichen, auch Schüttkegel zu berücksichtigen. Mit dieser Möglichkeit sollen die vorher beschriebenen Temperaturunterschiede der Brennelemente an der Oberfläche modelliert werden können.
- Das **Kugelabzugsrohr** sollte berücksichtigt werden können. Im VSOP-Modell ist das obere Ende des Abzugsrohrs die Untergrenze des Betrachtungsraums des Kugelfließmodells.

Die erste Version des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Modells berücksichtigt noch nicht die folgenden Aspekte:

- Die Modellierung dreidimensionalen Kugelfließens für Reaktorkonzepte, bei denen das Fließverhalten nicht rotationssymmetrisch ist (z. B. bei HTR mit feststehender Mittelsäule und mehreren Kugelabzügen).
- Die Modellierung des Brennstoffmanagements bei Kernreaktoren mit diskontinuierlichem Umsetzen des Brennstoffs (z. B. HTR mit prismatischen Blockelementen oder auch LWR).

Damit die vorher beschriebenen Erweiterungen zum Tragen kommen, müssen die anderen Modelle des HCP zum Teil auch erweitert werden. An dieser Stelle wird das Kugelfließen jedoch als allein-stehende Aufgabe betrachtet.

Das SHUFLE-Modell basiert auf der Vorstellung, dass das Kugelfließen durch aufeinanderfolgende Sickervorgänge abgebildet werden kann. In Abbildung 3.19 ist der Kugelabfluss aus einem Behälter dargestellt. Durch den semi-kontinuierlichen Abzug einzelner Kugeln am unteren Ende des Behälters wird das Gebilde aus Kugeln allmählich instabil. Dabei beginnen zu einem bestimmten Zeitpunkt kleine Anhäufungen von Kugeln zu kollabieren. Die so entstandenen Leerstellen (Hohlräume) werden erneut aufgefüllt [KAM2007]. Hierdurch entsteht eine sich nach oben fortpflanzende Welle nachrückender Kugeln (Sickervorgang). Diese Welle kommt erst dann zum Stillstand, sobald ein neuer Gleichgewichtszustand erreicht ist.

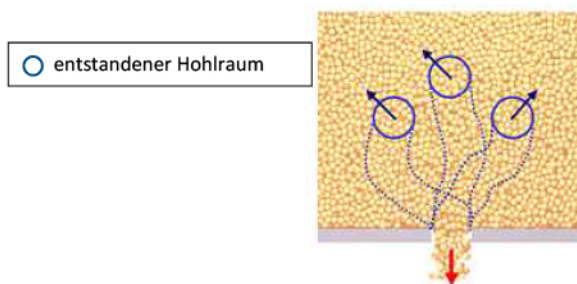


Abbildung 3.19: Sickervorgänge im Kugelhaufen [KAM2007]

Auch wenn das Maschennetz den Kugelhaufen im Vergleich zum Stromröhrenmodell höher auflöst, werden diese Sackvorgänge nicht auf dem Niveau einzelner Kugeln betrachtet. Die grundsätzliche Idee wird allerdings auf das Maschennetz übertragen.

SHUFLE arbeitet als Teil des HCP mit dessen Datenmodell. Aufgrund der Datenfülle wurde ein objektorientierter Ansatz gewählt [ALL2010], der auch für das Kugelfließmodell übernommen wird. Hauptobjekte im Kugelfließmodell sind „Batch“ und „Mesh“, die später auch von den anderen HCP-Modulen verwendet werden. Die für das Kugelfließen wichtigen Eigenschaften dieser Objekte sind in Tabelle 3.2 dargestellt.

Die Definition der Batch wurde aus VSOP übernommen. Eine Batch enthält ausschließlich Kugeln mit der gleichen Lebenshistorie, d. h. dass sie den gleichen Weg zurückgelegt haben, also mit den gleichen Bedingungen beaufschlagt worden sind. Die Anzahl der Brennelemente in einer Batch kann sich allerdings im Verlauf der Simulation ändern, was bei VSOP in der Regel nicht der Fall ist. Des Weiteren hat eine Batch in SHUFLE eine eindeutige Position innerhalb einer Masche und liegt nicht homogenisiert mit anderen Batches vor. Dies ist notwendig, da der Inhalt einer Masche nicht wie bei den Regionen als Ganzes umgesetzt wird. Die Batches liegen also als Stapel angeordnet vor (FIFO-Prinzip).

Tabelle 3.2: Für das Brennstoffmanagement wichtige Eigenschaften von Batch und Masche

<u>Eigenschaften der Batch</u>	<u>Eigenschaften der Masche</u>
Identifikationsnummer	Identifikationsnummer
räumliche Lage	Volumen
Brennstofftyp	Identifikationsnummer(n) der Batch(es)
Anzahl der Brennelemente	Häufigkeiten /Mischungsverhältnisse
Maschen-ID-Historie	

Eine Batch kann in SHUFLE nur Teil einer einzelnen Masche sein, da nur innerhalb einer Masche gleiche Bedingungen angenommen werden. Eine Masche ist ein theoretisches Volumenelement des untersuchten Cores und kann prinzipiell eine beliebige Anzahl von Batches fassen. Eine Masche kann sowohl eine definierte Masche im Core sein, als auch ein Volumenelement zur Aufnahme von frischen oder abgebrannten Brennelementen darstellen. Vorteil dieser generischen Vorgehensweise bei den Objekten ist, dass der Algorithmus zum Umsetzen von Maschen allgemeingültig ist und es für die Rechnung irrelevant ist, ob Batches zwischen Coremaschen oder zwischen einer Coremasche und einem externen Speicher verschoben werden.

Nachdem die zum Verständnis des Algorithmus notwendige Datenstruktur erklärt ist, kann die generelle Modellierung näher erläutert werden. Wie bereits angesprochen, verhält sich die Bewegung des Kugelhaufens wie eine laminare Strömung. Das Kugelfließen wird in SHUFLE durch ein sukzessives Umsetzen der Batches zwischen Maschen realisiert. Im ersten Schritt bestimmt SHUFLE, zwischen welchen Maschen aus physikalischer Sicht prinzipiell umgesetzt werden darf. Dazu wird aus den gegebenen Fließkurven (siehe Abbildung 3.20a) für jeden axialen Satz von Maschen eine mittlere Fließkurve gebildet, die durch den volumen-gewichteten Mittelpunkt der obersten Masche verläuft, da die Kugeln hier ihren Weg durch das Core starten (siehe Abbildung 3.20b). Das Maschennetz wird mit diesen interpolierten Fließkurven, die die Bewegung der Batches grobmaschig beschreiben, überzogen. Die stetig verlaufenden Fließkurven werden anschließend diskretisiert. Benachbarte Maschen, die von der gleichen Fließkurve durchlaufen werden, werden miteinander verbunden. Dies

resultiert in einer Kette von Maschen (Fließkette). Das Ergebnis ist am Beispiel der dritten gemittelte Fließkurve in Abbildung 3.20c dargestellt. Beim Umwälzen des Cores werden die Batches entlang dieser Fließketten umgesetzt.

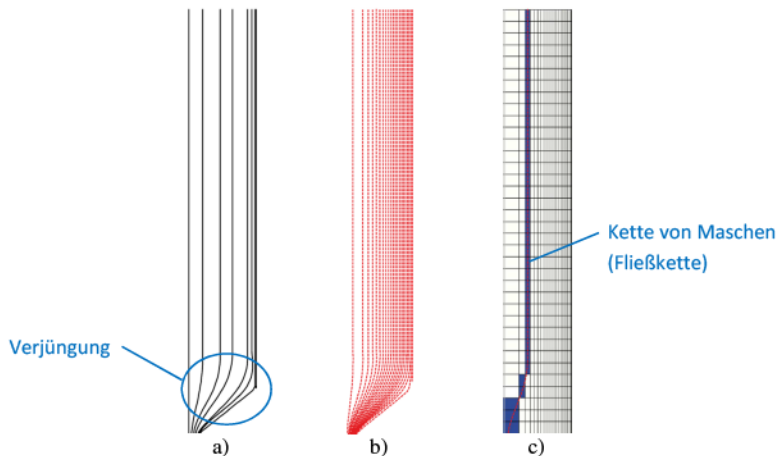


Abbildung 3.20: a) vorgegebene Fließkurven [XHO2012a]
b) gemittelte Fließkurven (jeweils eine für jede radiale Masche)
c) vernetzte Maschen

Im unteren Bereich des Kugelhaufens, in dem eine Verjüngung auftritt, kann eine Masche zu mehreren Fließketten gehören. Die vernetzten Maschen im unteren Corebereich liegen zum Teil aufeinander. An einem Ort, an dem die digitalisierten Kurven zum ersten Mal deckungsgleich sind, hat eine Masche mehrere benachbarte Maschen, mit denen sie verbunden ist. Diese Maschen werden im Modell auch Verzweigungspunkte genannt, da ein Sickerprozess an diesem Punkt nicht mehr eindeutig definiert ist und mehrere Möglichkeiten, den weiteren Weg nach oben zu verfolgen, existieren.

Das Ergebnis des gesamten Vorganges ist ein Graph von Maschen (siehe Abbildung 3.21). Der Graph stellt eine starke Abstrahierung der geometrischen Gegebenheiten und des Kugelfließens dar. Nur die für das Umsetzen der Batches wichtigen Informationen, wie z. B. die Maschenvolumina, die enthaltenen Batches und die möglichen Transportvorgänge, symbolisiert durch eine Verbindungsline, sind enthalten. Ein Transport von Batches ist nur zwischen verbundenen Maschen möglich.

In der jetzigen Version von SHUFLE findet diese Vernetzung der Maschen einmalig vor Beginn der Rechnung statt. Damit wird angenommen, dass das Fließverhalten sich während der Rechnung nicht ändert. Das heißt, dass Sondervorgänge, wie z. B. ein Entladen des Cores mit dem einmalig am Anfang definierten Fließverhalten nicht abgebildet werden kann. SHUFLE könnte allerdings mit geringem Aufwand in dieser Hinsicht erweitert werden. Im Rahmen dieser Arbeit bestand allerdings nicht die Notwendigkeit, eine Änderung des Fließverhaltens während eines Simulationslaufs zu simulieren. Bei einer Entladung des HTR-Cores treten zusätzliche Phänomene zu Tage, die dem angenommenen laminaren Fließverhalten widersprechen.

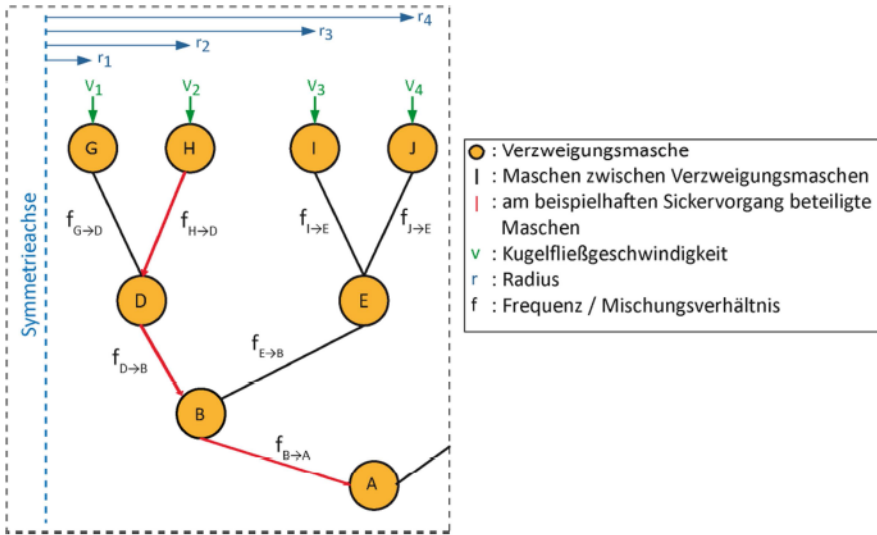


Abbildung 3.21: Ausschnitt aus dem Graphen von Maschen (nur Maschen, zwischen denen Batches transferiert werden können, sind verbunden)

Mit dem Graphen sind zunächst nur die Umsetzungsmöglichkeiten festgelegt. Die Wahrscheinlichkeiten bzw. Mischungsverhältnisse „f“ an den Verzweigungspunkten bestimmen die relativen Brennelementanzahlen, die von den Vorläufermaschen (z. B. Masche „G“ und „H“) in eine darunterliegende Masche (z. B. „D“) umgesetzt werden und somit die Geschwindigkeitsverhältnisse im Core. Die Bedeutung dieser Faktoren hängt vom Betriebsmodus ab und wird später im Detail erklärt. Das Geschwindigkeitsprofil am oberen Ende des Kugelhaufens wird herangezogen, um diese Faktoren zu bestimmen. Dazu werden die Ergebnisse einer CFX-Rechnung herangezogen, bei der der Kugelhaufen als laminare Flüssigkeit modelliert wird [MAR2011]. Auf diese Weise werden die Wahrscheinlichkeiten bzw. Mischungsverhältnisse zu an den verschiedenen Knoten bestimmt. Dabei werden die Knoten von oben nach unten sukzessive behandelt. In dem Beispiel werden zuerst die Mischungsverhältnisse für die Knoten „D“ und „E“ bestimmt, danach für den Knoten „B“ und abschließend für den Knoten „A“. Die Wahrscheinlichkeit bzw. das Mischungsverhältnis f_x an einer Kante im Graphen die zu der x-ten Vorläufermasche führt, wird nach folgender Gleichung berechnet:

$$f_x = \frac{v_x \cdot A_x}{\sum_i^n v_i \cdot A_i}, \quad \text{Beispiel: } f_{H \rightarrow D} = \frac{v_2 \cdot A_H}{v_1 \cdot A_G + v_2 \cdot A_H} \quad 3.6$$

mit:

N	- Gesamtanzahl an Vorläufermaschen	
A_i, A_x	- Grundfläche der i-ten bzw. x-ten Vorläufermasche	[m ²]
v_i, v_x	- Geschwindigkeiten der i-ten bzw. x-ten Vorläufermasche im Maschenmittelpunkt	[m/s]

Diese Formel lässt sich aus geometrischen Überlegungen herleiten. Nachdem der Graph und die Gewichte vollständig definiert sind, kann das Core mit Brennelementen gefüllt werden. Auch in SHUFLE wird das quasi-kontinuierliche Kugelfließen diskontinuierlich abgebildet. Nach dem Füllen können Sickervorgänge durch Entnahme von Brennstoffvolumina an der unteren Seite des Cores ausgelöst werden. Von oben bzw. seitlich rücken Batches auf Basis des vorher bestimmten Graphen nach, um die entstandene Leerstelle aufzufüllen. Dieser Prozess geht solange weiter, bis entweder

die Oberfläche der Kugelschüttung oder ein Verzweigungspunkt im Graphen erreicht wird. Sobald eine Masche mit mehreren darüber- bzw. danebenliegenden vernetzten Maschen erneut aufgefüllt werden soll, gibt es verschiedene Betriebsmodi:

- 1) Es werden Batches von lediglich einem vernetzten Nachbarn genommen. Die vorher bestimmten Faktoren „ f “ stellen in diesem Fall Wahrscheinlichkeiten dar. Abbildung 3.22a ist dieser Vorgang für ein Beispiel, bei dem die am Vorgang beteiligten Maschen das gleiche Volumen und den identischen Füllfaktor haben, gezeigt. Dabei wird die Verzweigungsmasche in 25 % aller Zeitschritte von der linken Masche und in 75 % aller Zeitschritte von der rechten Masche aufgefüllt. Dies führt dazu, dass nicht alle Maschen im Core zu jedem Zeitschritt am Kugelfließen beteiligt sind. Hierdurch können kurzfristig leichte Geschwindigkeitsunterschiede zwischen benachbarten Kanälen auftreten. Nur über mehrere Zeitschritte ist gewährleistet, dass das gewünschte Geschwindigkeitsprofil reproduziert wird.
- 2) Im zweiten Betriebsmodus werden Batches aus allen vorgelagerten Nachbarmaschen genutzt, um die Masche aufzufüllen. Die vorher bestimmten Faktoren „ f “ stellen in diesem Fall Mischungsfaktoren dar. In diesem Betriebsmodus gibt es noch eine weitere Unterteilung.
 - a) Bei der präziseren Beschreibung des Kugelfließens bleiben die verschobenen Batches nach dem Umsetzen erhalten und werden nicht vermischt. Falls das aufzufüllende Volumen kleiner ist als die Batch, muss die Batch geteilt werden, da eine Batch definitionsgemäß nur Teil einer einzigen Masche sein kann. Dies führt allerdings dazu, dass zu jedem Zeitschritt die Anzahl der Batches im Core zunimmt (siehe Abbildung 3.22b). Dies kann bei einem Gitter, bei dem die Volumina sehr unterschiedlich sind, zu einem sehr schnellen Anstieg der Anzahl der Batches führen.
 - b) Bei der zweiten Möglichkeit werden die verschobenen Batches nach dem Umsetzen vermischt. Nur Batches vom gleichen Brennstofftyp und gleicher Durchlaufzahl können gemischt werden. Hiermit kann im Nachhinein nicht mehr auf die Eigenschaften der einzelnen Batches geschlossen werden. Die Zunahme der Batchanzahl ist in diesem Fall sehr viel geringer.

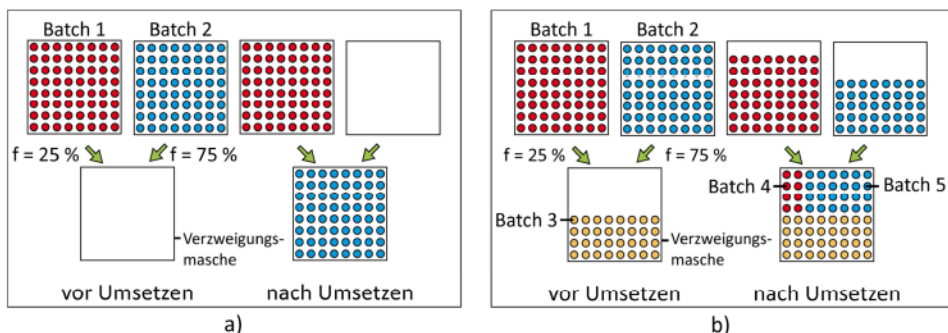


Abbildung 3.22: Verschiedene Strategien zum Umsetzen von Batches an einem Verzweigungspunkt
 a) Umsetzen unter Berücksichtigung von Wahrscheinlichkeiten (ohne Mischen)
 b) Umsetzen von Batches, wobei alle vernetzten Maschen am Vorgang beteiligt sind (ohne Mischen nach dem Umsetzen)

Bei der Teilung einer Batch werden alle Eigenschaften der zu teilenden Batch auf die neue Batch übertragen. Nach der Teilung wird ein passender Teil der Batch in die Zielmasche geschoben. Da beide Batches jetzt in einer unterschiedlichen Masche vorliegen, werden andere Randbedingungen in der Fluidodynamik oder Neutronendynamik aufgeprägt. Hierdurch bauen sie nach einer Teilung unterschiedliche Lebenshistorien (Neutronenfluss, Temperatur usw.) auf.

Beim Umwälzen des Cores sind die Zeitschrittweite, die Abzugsrate und das abgezogene Volumen durch folgende Gleichung miteinander verknüpft:

$$\Delta t_{\text{Shuffle}} = \frac{\text{Vol}_{\text{Abzug}}}{\dot{n}_{\text{BE}} \cdot \text{Vol}_{\text{Kug}}} \tag{3.7}$$

mit:	$\text{Vol}_{\text{Abzug}}$	- Das zu jedem Zeitschritt abgezogene Kugelvolumen	$[\text{m}^3]$
	Vol_{Kug}	- Kugelvolumen	$[\text{m}^3]$
	\dot{n}_{BE}	- Brennelementabzugsrate	$[\text{1/h}]$
	$\Delta t_{\text{Shuffle}}$	- Zeitschrittweite des Brennstoffmanagements	$[\text{h}]$

Sowohl die Größe $\text{Vol}_{\text{Abzug}}$ als auch die Zeitschrittweite $\Delta t_{\text{Shuffle}}$ kann im Rechenmodell vorgegeben werden. Die jeweils andere Größe ist durch Gleichung 3.7 eindeutig festgelegt. Die mittlere Abzugsrate beim HTR-Modul liegt im Nennleistungsbetrieb bei 5.360 Brennelementen pro Tag [GER1993]. Zu jedem Zeitschritt des Brennstoffmanagements wird das Brennstoffvolumen $\text{Vol}_{\text{Abzug}}$ am unteren Ende des Reaktors abgezogen.

Validierung von SHUFLE an ANABEK-Versuchsergebnissen

Zu einer ersten Validierung des SHUFLE-Modells wird der ANABEK-Versuch herangezogen. Zuerst wird die Versuchsanlage und danach die Abbildung des Versuchsstandes mit SHUFLE dargestellt. Abschließend werden die mit SHUFLE ermittelten Ergebnisse experimentellen Daten gegenübergestellt.

Das Fließverhalten von Schüttgütern in Silos wird schon seit Jahrhunderten untersucht und ist immer noch Gegenstand von Forschungsaktivitäten. Anfang der 1990’er Jahre wurde eine Testanlage ANABEK (Analyse der Belastungen des Kernaufbaus) zur Untersuchung der Reflektorbelastrung durch die statische und dynamische Belastung der Kugelschüttung aufgebaut [BAB1992]. Obwohl die Anlage ursprünglich nur für die vorher genannte Fragestellung konzipiert war, stellte sich heraus, dass sie auch zur Untersuchung des Fließverhaltens der Kugelschüttung geeignet war [BAB1992]. Der Versuchsstand entsprach einer vollständigen dreidimensionalen Abbildung des HTR-Modul im Maßstab 1:6. Details des Versuchsstandes sind in Tabelle 3.3 und 3.4 aufgeführt.

Tabelle 3.3: Grundlegende Eigenschaften der ANABEK-Versuchsanlage

Geometrie	
Modellmaßstab	1:6
Durchmesser des Behälters	500 mm
Höhe des Behälters	1.600 mm
Abzugskanaldurchmesser	40 mm
Neigungswinkel des Bodenreflektors	30°
Umwälzrate	4.600 Kugeln/h

Tabelle 3.4: Geometrie und Material der eingesetzten Kugeln

Kugel	
mittlerer Durchmesser	10 mm
Material	Polyacetat ($1,41 \text{ g/cm}^3$) (bei den Fließexperimenten)
Anzahl im Behälter	360.000

Die Anlage ist in Abbildung 3.23 schematisch dargestellt.

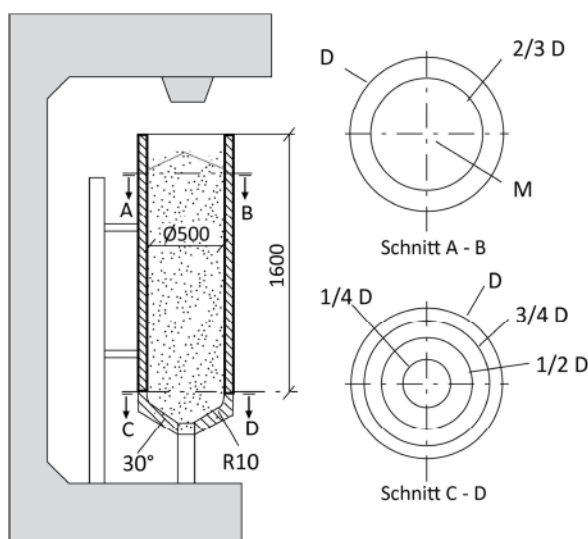


Abbildung 3.23: Skizze des ANABEK-Versuchsstandes [BAB1992] (eigene Darstellung)

Dabei wurden Testkugeln verschiedener Materialien (Steatit, Graphit und Kunststoff) eingesetzt, da es keinen Werkstoff gab, der bei dem skalierten Prüfstand gleichzeitig alle wichtigen Ähnlichkeitsbedingungen, sowie

- Gleit- und Haftreibung Kugel auf Kugel
- Gleit- und Haftreibung Kugel gegen Wand
- Ähnlichkeitsziffer (E-Modul / Dichte).

abdeckt [BAB1992]. Gemeinsam jedoch decken die drei Werkstoffe die o. g. Ähnlichkeitsbedingungen ab [BAB1992]. Die Experimente wurden bei Raumtemperatur und in Luftatmosphäre durchgeführt. Verschiedene Quellen (z. B. [BAB1992]) belegen, dass die Temperatur und das Betriebsmedium sowie dessen Reinheit das Fließverhalten ebenfalls beeinflussen. Dies wurde allerdings bei den ANABEK-Versuchen nicht untersucht.

Vor Versuchsbeginn wurde die Kugelschüttung mehrmals umgewälzt, damit zu Versuchsbeginn ein repräsentativer Kugelhaufen vorlag. Nach dem Präparieren des Kugelhaufens wurden dem Behälter an unterschiedlichen Stellen markierte Testkugeln zugeführt, um das Fließverhalten einzelner Zonen zu untersuchen.

Bei einem der durchgeführten ANABEK-Versuchen wurde die eingeebnete Oberfläche des Kugelhaufens mit einer gleichmäßigen Schicht markierter Kugeln überzogen. Dieser Versuch wurde zur Messung der Verteilungsfunktion der Durchlaufzeiten durchgeführt. Im Laufe des Versuchs wurde der Kugelhaufen mit einer konstanten Abzugsgeschwindigkeit (4.600 Kugeln pro Stunde [BAB1992]) umgewälzt. Damit liegt die Abzugsgeschwindigkeit im Vergleich zum HTR-Modul um den Faktor 25 höher. Ein Detektor am unteren Ende des Kugelabzugs registrierte die abgezogene Anzahl markierter und nicht-markierter Kugeln und hielt auch den Zeitpunkt fest. Der Kugelhaufen wurde solange umgewälzt bis alle markierten Kugeln den Versuchsstand am unteren Ende verlassen hatten. Als Ergebnis des Versuches wurden die Verweilzeitspektren und die zugehörigen Summenkurven gebildet. Die Summenkurve beschreibt, welcher Anteil der Kugeln (markierte und nicht markierte) den Behälter nach einer bestimmten Versuchszeit verlassen hat. Je gleichmäßiger das Kugelfließen, desto enger ist das Intervall, in dem die Summenkurve von 0 auf 100 ansteigt. Die Verweilzeitfunktion, nach der die Kugeln den Behälter verlassen, ist gegeben durch [BAB1992]:

$$\varepsilon(uV_{UC}) = \frac{1}{\sum n_{TK}} \cdot \frac{dn_{TK}(V_{UC})}{dV_{UC}} \quad 3.8$$

mit: V_{UC} - umgewälztes Corevolumen [m³]
 n_{TK} - Anzahl abgezogener Testkugeln (markierter Kugeln)

Eine gemessene Verweilzeitkurve ist in Abbildung 3.24 dargestellt. Mit den im Versuch gemessenen (Abzugs-)Chargengrößen pro V_{UC} -Intervall (ΔK) ergibt sich folgende zeitdiskrete Funktion [BAB1992]:

$$\varepsilon(uV_{UC}) = \frac{\Delta n_{TK}(V_{UC})}{\sum n_{TK}} \cdot \frac{\sum n_K}{\Delta n_K} \quad 3.9$$

mit: n_K - Gesamtanzahl abgezogener Kugeln

Aus dem Verweilzeitspektrum lässt sich ableiten, wie gleichmäßig das räumliche Fließverhalten im Versuchsstand bzw. Reaktorcore ist. Je steiler die Verweilzeitkurve, umso gleichmäßiger ist die Geschwindigkeit über den Radius. Die Ergebnisse für den Versuch, bei dem das Gesamtverhalten des Kugelhaufens untersucht wurde, sind in Abbildung 3.24 dargestellt.

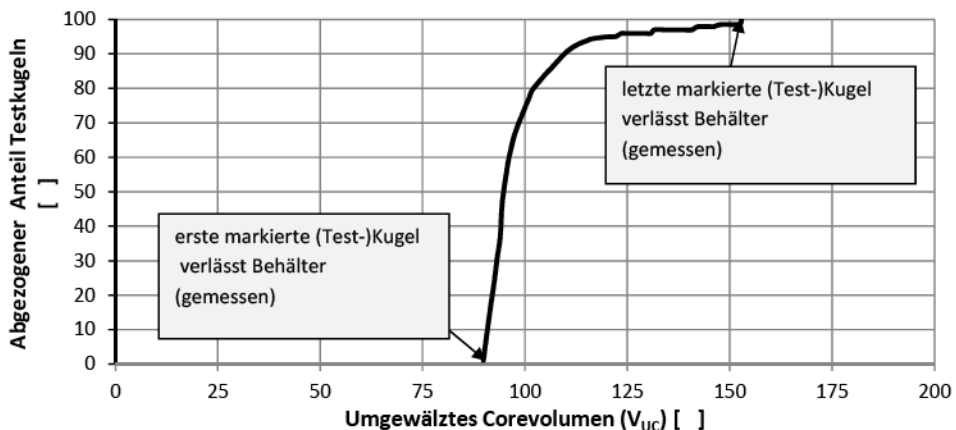


Abbildung 3.24: Verweilzeitspektrums des ANABEK-Versuchsstandes [BAB1991]

Der gemessene Verlauf zeigt, dass die Mehrheit der markierten Kugeln den Versuchstand in einem recht engen Zeitintervall verlässt. Bei ungefähr 92 umgewälztes Corevolumen hat die erste Testkugel den Behälter verlassen, und die Verweilfunktion steigt stark (steil) an auf ca. 75 Testkugeln bei 100 umgewälztes Corevolumen. Danach allerdings flacht die Kurve stark ab und die Rate, mit der die markierten Kugeln den Versuchsstand verlassen, nimmt schnell ab. Die letzte markierte Kugel erreicht das Abzugsrohr erst, nachdem 153 des gesamten Kugelhaufenvolumens umgewälzt wurden. Wie der Versuch gezeigt hat, liegt aufgrund des großen Verhältnisses von Höhe zu Durchmesser ein relativ gleichmäßiges Kugelfließen vor.

Modellierung von ANABEK mit SHUFLE

Der ANABEK-Versuch wird für einen ersten Validierungsschritt des SHUFLE-Algorithmus herangezogen. Bei der Modellierung des Versuchs in SHUFLE wird die genaue Geometrie des Versuchstandes abgebildet. Die markierten Kugeln werden nicht einzeln, sondern durch eine homogene Schicht mit einem mittleren Füllfaktor von 0,61 abgebildet. Dabei wird die Höhe dieser Schicht auf die Gesamtanzahl der markierten Kugeln adaptiert. In dem ANABEK-Versuch sind keine Stromlinien gemessen worden. Aus diesem Grund dienen Fließkurven aus anderer Literatur als Eingabe [POH2009]. Die Geschwindigkeitsverhältnisse am oberen Ende des Kugelhaufens werden einer separaten CFX-Rechnung, in der der Kugelhaufen durch eine zähe Flüssigkeit abgebildet wird, entnommen [MAR2011].

Im ersten untersuchten Betriebsmodus, bei dem eine Masche an einem Verzweigungspunkt pro Zeitschritt lediglich von einer benachbarten Masche befüllt wird, wurde das Gitter so gewählt, dass alle Maschenvolumina gleich groß sind. Dieser Fall, bei dem die Batches ohne Teilungen umgesetzt werden können, ist der einfachste Fall. Dies wird durch eine konstante Maschenhöhe erreicht. Dabei können alle Batches einer Masche gemeinsam umgesetzt werden. Aufgrund der Volumengleichheit besteht keine Notwendigkeit, die Batches aufzuteilen. Zu jedem Zeitschritt werden dem Core weitere Batches zugegeben, damit das anfängliche Füllstandsniveau erhalten bleibt. Abbildung 3.25a zeigt die Rechenergebnisse bei der Anwendung von Wahrscheinlichkeiten.

Im Betriebsmodus, bei dem alle Batches einer Masche in eine andere Masche umgesetzt werden, ist der Geschwindigkeitsunterschied zwischen horizontal benachbarten Maschen schon bei 25 umgewälzten Corevolumens deutlich erkennbar (siehe Abbildung 3.25a). Im Betriebsmodus, bei dem alle Maschen zu jedem Zeitpunkt am Kugelfließen beteiligt sind, sind keine große Sprünge bei den vertikalen Positionen der markierten Batches (rot) erkennbar (siehe Abbildung 3.25b). Das Gitter in diesem Beispiel ist willkürlich gewählt, um die Anwendbarkeit des Algorithmus auch auf beliebige Gitter zu demonstrieren. Am Anfang der Rechnung gibt es ebenso viele rotmarkierte Batches wie radiale Maschen. Im Laufe der Rechnung müssen die Batches geteilt werden, da die Maschenvolumina nicht gleich sind und an Verzweigungspunkten Batches aus verschiedenen benachbarten Maschen herangezogen werden müssen, um den entstandenen Leerraum aufzufüllen. Im letzten dargestellten Zeitschritt sind die markierten Batches im trichterförmigen Bereich des Versuchstandes angekommen. Aufgrund von vermehrter Aufteilung sind die Batches deutlich kleiner und zahlreicher geworden.

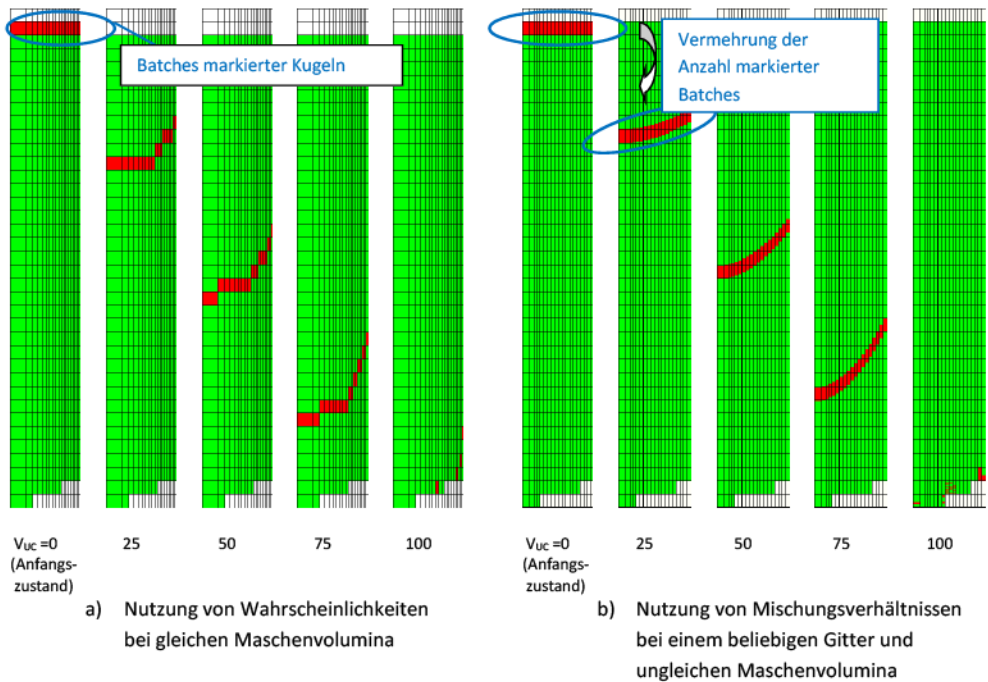


Abbildung 3.25: SHUFLE-Rechnenergebnisse für die ANABEK-Versuchsanlage

In Abbildung 3.26 sind die Rechenergebnisse der gemessenen Verweilzeitkurve gegenübergestellt.

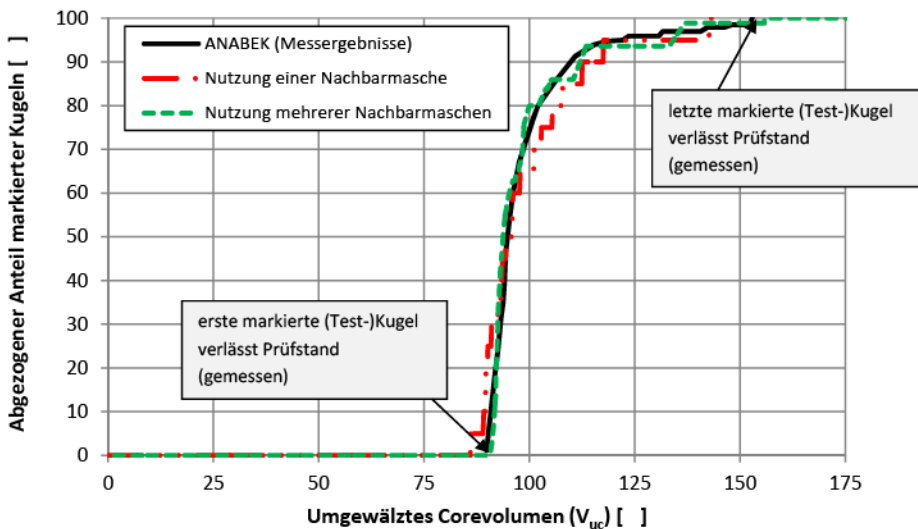


Abbildung 3.26: Vergleich des gemessenen ANABEK-Verweilzeitspektrums im Vergleich zu SHUFLE-Rechnenergebnissen

Die Messergebnisse werden, trotz größerem Maschengitter, bei der Einbeziehung von lediglich einem Nachbarn bei Verzweigungsmaschen sehr gut reproduziert. Der Zeitpunkt, an dem in der

Rechnung die ersten markierten Kugeln abgezogen werden, liegt um $5 \cdot V_{UC}$ vor dem gemessenen Zeitpunkt. Ab diesem Zeitpunkt verlassen die markierten Kugeln den Behälter mit einer geringeren Rate, so dass der Zeitpunkt, an dem 50 der markierten Kugeln entnommen worden sind, mit dem gemessenen Zeitpunkt übereinstimmt. Lediglich die letzten markierten Kugeln verlassen den Behälter in der SHUFLE-Rechnung um $13 \cdot V_{UC}$ früher. Durch die Beteiligung aller vernetzten Nachbarmaschen im zweiten Betriebsmodus nähern sich die Rechenergebnisse den Messergebnissen weiter an. Die ersten 70 der markierten Kugeln werden zu fast identischen Zeitpunkten dem Behälter entnommen. Danach sind in dem gerechneten Verweilzeitspektrum Treppen zu erkennen, die auf die geringe Anzahl radialer Maschen zurückzuführen sind. Hierdurch pendelt der berechnete Verlauf um den gemessenen Verlauf, der monoton ansteigt. In diesem Betriebsmodus verlässt die letzte Batch mit Testkugeln den Behälter um $3 \cdot V_{UC}$ vor dem gemessenen Zeitpunkt.

Die erfolgreiche Abbildung des ANABEK-Versuchs mit SHUFLE ist nur ein erster Schritt im gesamten Validierungsprozess. Weitere Vergleichsrechnungen werden benötigt, damit das Programm als verifiziert und validiert gelten kann. Dabei sollen besonders Vergleichsrechnungen für Behälter, die vom ANABEK-Versuchsstand abweichen (z. B. Behälter mit mehreren Abzügen oder Einbauten, die das Kugelfließen beeinträchtigen) durchgeführt werden.

Der Code SHUFLE wurde als Prototyp im Rahmen einer Machbarkeitsstudie für das HCP-Projekt [KAS2012a] entwickelt. Aufgrund des erfolgreichen Ausgangs der Studie befindet sich derzeit eine HCP-konforme SHUFLE-Anwendung in der Entwicklung. Wegen des derzeit noch hochgradig experimentellen Charakters dieses Programms wurde jedoch von einer Integration in STACY abgesehen. Daher ist die Freisetzungsberechnung derzeit noch auf VSOP-Rechenergebnisse angewiesen, die mit Hilfe des Stromröhrenmodells bestimmt wurden. In Abschnitt 4.1.1 wird später gezeigt, dass das Kugelfließen im Falle des HTR-Modul gut mit dem Stromröhrenmodell abgebildet werden kann.

3.4 Abbrandrechnung mit TNT

Das Abbrandcode TNT (Topological Nuclide Transmutation) simuliert den zeitlichen Verlauf des Abbrandes für einen vorgegebenen Nuklidvektor [KAS2012b]. Das Programm wurde im Rahmen des HCP-Projektes entwickelt. Gleichwohl das Ausgangsprogramm ORIGEN als validiert gelten kann, bestehen bei einigen Eingabedaten noch gewisse Kenntnislücken [MOO1987]. Vergleiche von gemessenen Inventaren aus LWR-Brennelementen mit berechneten Inventaren aus ORIGEN zeigen allerdings, dass Spaltproduktinventare mit einer für Störfallbetrachtungen ausreichenden Genauigkeit berechenbar sind [GAU1995].

Eine Neuentwicklung wurde aus verschiedenen Gründen angestrebt. Die in ORIGEN betrachteten Prozesse und einige nukleare Daten sind statisch im Quellcode verankert, die durch Nicht-Autoren nur mit hohem Aufwand an neue Anforderungen angepasst werden können. Des Weiteren wird aufgrund der hohen Anzahl der Abbrandrechnungen, die beim HCP durchgeführt werden müssen, eine interne Kopplung zwischen Abbrandcode und Hauptprogramm angestrebt. Diese Art der Kopplung ist mit ORIGEN nur schwer umzusetzen.

3.4.1 Berechnung der Nuklidinventare

In TNT werden die Nuklidketten, das heißt die Nuklide und die Reaktionen zwischen ihnen, als Graph abgebildet. In Abbildung 3.27 ist beispielhaft ein kleiner Ausschnitt eines solchen Graphen dargestellt.

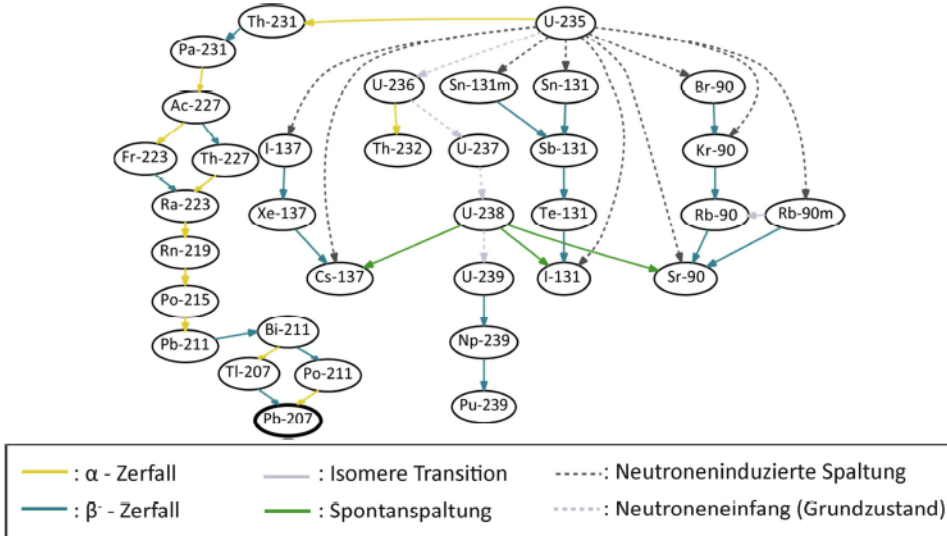


Abbildung 3.27: Ausschnitt aus einem von TNT erzeugten Graphen zur Darstellung von Isotopen, Zerfallsprozessen und neutroneninduzierter Prozesse einer nuklearen Datenbibliothek

Die Abbildung zeigt nur einen Teil der insgesamt 3.846 Nuklide und aller Reaktionstypen, die von der nuklearen Datenbibliothek ENDF/B-VII.0 erfasst sind und somit durch TNT berücksichtigt werden. Der Graph wird nach dem Lesen der Datenbibliothek vollautomatisch aufgebaut. Darauf basierend wird das Gleichungssystem, das die zeitliche Entwicklung der Nukliddichten beschreibt, aufgebaut und anschließend gelöst. Erste Verifikations- und Validierungsrechnungen haben zufriedenstellende Ergebnisse geliefert [HER2012]. Mit der gleichen Datenbibliothek können ORIGEN-Ergebnisse mit TNT reproduziert werden [HER2012].

Das Abbrandcode TNT wurde verwendet, um den zeitlichen Abbrand einzelner Brennelemente zu berechnen. Der Nuklidvektor eines frischen HTR-Modul-Brennelements ist in Tabelle 3.5 in seiner Gesamtheit dargestellt. Im Graphit vorhandene Verunreinigungen, wie z. B. Calcium, Schwefel, Silizium, Eisen [DRU1982], bleiben unberücksichtigt. Analog zu VSOP werden die Verunreinigungen durch ein Bor-Äquivalent in der TNT-Rechnung erfasst.

Für jeden Aufenthalt in einer Region werden in STACY auf Grundlage der räumlichen Verteilung der maschenbasierten Breitgruppenneutronenflüsse aus VSOP räumlich gemittelte Breitgruppenflüsse für die Region bestimmt. Bei einer üblichen Einteilung der Regionen (in etwa 20 Regionen je Kanal), werden beim HTR-Modul ungefähr 300 Regionen durchquert, bevor ein Tracer-Brennelement dem Core entnommen wird. Damit der Rechenaufwand bei der hohen Anzahl Brennelementkugeln auf einem akzeptablen Niveau bleibt, wird in der Abbrandrechnung innerhalb einer Region die gleiche Neutronenflussverteilung angenommen. Die Zeitschrittweite in der Abbrandrechnung entspricht demnach der Verweilzeit in einer Region (die definitionsgemäß für jede Region gleich ist).

Tabelle 3.5: Nuklidinventar eines frischen Kugelbrennelements im Gleichgewichtscore des HTR-Modul mit 7 g Schwermetall und einem U-235-Anreicherungsgrad von 7,4 (*ZAM, Z : Ordnungszahl, A : Massenzahl, M : Energiezustand)

Nuklid	ZAM*	Nuklidinventar [mol]
U-234	922340	$2,03150 \cdot 10^{-5}$
U-235	922350	$2,20311 \cdot 10^{-3}$
U-238	922380	$2,72003 \cdot 10^{-2}$
B-10	50100	$5,50175 \cdot 10^{-7}$
B-11	50110	$2,21452 \cdot 10^{-6}$
C-12	60120	$1,62631 \cdot 10^1$
O-16	80160	$5,88469 \cdot 10^{-2}$
Si-28	140280	$6,08348 \cdot 10^{-2}$
Si-29	140290	$3,09045 \cdot 10^{-3}$
Si-30	140300	$2,03963 \cdot 10^{-3}$

Die mit VSOP bestimmten Breitgruppenflüsse des Gleichgewichtscore, die im Neutronikgitter vorliegen (siehe Abbildung 3.28), werden durch Volumenmittelung in Region-gemittelte Breitgruppenflüsse umgewandelt (siehe Anhang 12).

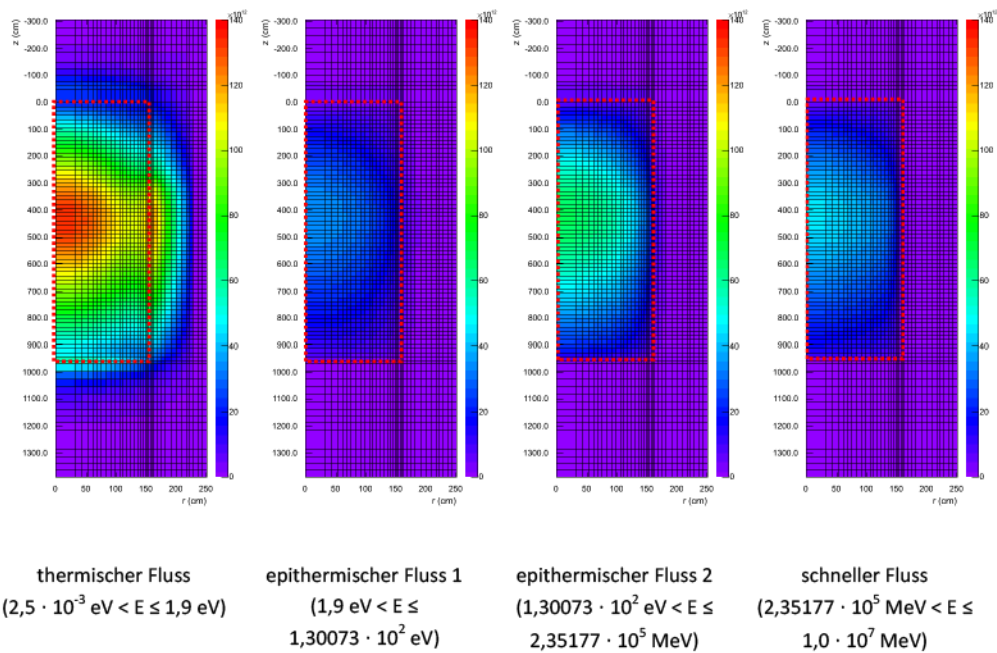


Abbildung 3.28: Breitgruppenflüsse im HTR-Modul-Gleichgewichtscore, bestimmt mit VSOP (die rot umrandeten Rechtecke grenzen das aktive Core ein)

Die Ergebnisse sind exemplarisch für den HTR-Modul in Anhang 12 dargestellt. In diesem Modell wird das Kugelfließen mit vier Fließkanälen approximiert. Üblicherweise ist das Regionen-Gitter weniger fein aufgelöst, wodurch treppenförmige Verläufe zu Tage treten. Des Weiteren wird die Gesamtleistung direkt aus den Beiträgen der „n“ Einzelreaktionen nach folgender Gleichung berechnet:

$$\dot{Q}_{\text{ges}} = \sum_i^n \text{Rate} \cdot \dot{Q}_i$$

3.10

In VSOP wird prinzipiell mit einer nuklidspezifischen Energiefreisetzung gerechnet. Diese Energie wird in der Realität allerdings nicht in Gänze sofort und lokal freigesetzt, sondern enthält Beiträgen aus zeitverzögerten Zerfällen von Tochternukliden. Der in TNT implementierte Ansatz liefert präzisere Ergebnisse, da separate „Q-Werte“ für Zerfälle, Spaltung- und Einfangsreaktionen verwendet werden. In Abbildung 3.29 sind die mit TNT berechneten Leistungen für ein Brennelement des HTR-Modul dargestellt, das ausschließlich durch den innersten Fließkanal (durchgezogene Linie) bzw. durch den äußersten Kanal (gestrichelte Linie) fließt. Als Eingabe für die Abbrandrechnung dienen Breitgruppenflüsse aus VSOP. Ersichtlich wird, dass die maximale Leistung bei dem betrachteten Brennelement im zweiten Durchlauf erreicht wird, was sich auf den Aufbau von Plutonium-Isotopen zurückführen lässt, die im anfänglichen Nuklidvektor nicht vorhanden sind und im Laufe der Zeit erbrütet werden. Insgesamt nimmt die Leistung aufgrund zunehmenden Abbrandes und dem damit verbundenen Aufbau von Spaltprodukten ab. Bei Störfallbetrachtungen kann dieser Ansatz auch als Ersatz für die Nachzerfallsleistungsberechnung nach DIN 25485 dienen.

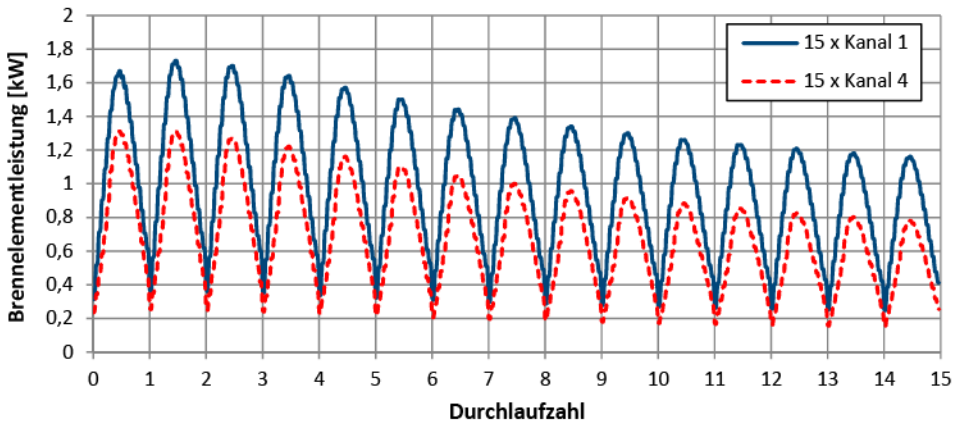


Abbildung 3.29: Brennelementleistung nach TNT in Abhängigkeit von der Durchlaufzahl
(Gleichgewichtscore des HTR-Modul, STACY-Modell mit 4 Fließkanälen)

Abbildung 3.30 zeigt die Kopplung von STACY und TNT. Wie in Abschnitt 3.3 beschrieben, werden mit Hilfe eines Zufallsgenerators willkürliche Wege durch das Core generiert. Zur Bestimmung der Neutronenflusshistorien werden die mittels VSOP-Rechnung ermittelten Breitgruppenflüsse entlang dieser Wege herangezogen. Für jedes Tracer-Brennelement wird eine separate Eingabedatei für TNT erzeugt, die die Zeitschrittsteuerung, die energetische Neutronenflussverteilung für die gesamte Lebensdauer und den Nuklidvektor eines frischen Brennelements enthält. Des Weiteren werden alle Wege durch das Core in Form von radialen Anfangspositionen am oberen Ende des Cores in einer separaten Datei festgehalten. Die von der vorgelagerten Prozedur (STACY-Preprocessing) generierten Wege werden im Hauptprogramm nicht neu generiert, sondern aus der Datei eingelesen. Dies vermeidet das Risiko, das durch eine Änderung von z. B. der Anfangszahl des Zufallsgenerators neue Wege generiert werden, die nicht zu den TNT-Ausgabedaten gehören. Die durch den Zufallsgenerator generierte Zahlenfolge wird durch eine vorgegebene Anfangszahl eindeutig festgelegt. Diese wird in der Eingabe vorgegeben. Damit konnte der Nachweis erbracht werden, dass die Endergebnisse nicht von dieser Anfangszahl beeinflusst werden.

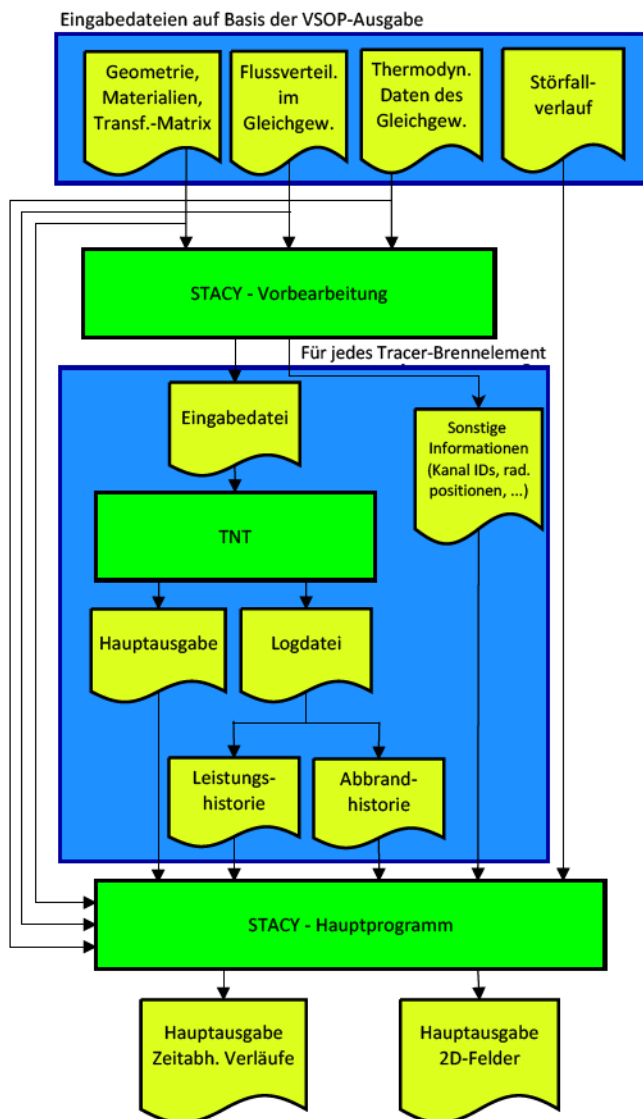


Abbildung 3.30: Kopplung zwischen Abbrand- (TNT) und Spaltproduktfreisetzungsrechnung (STACY)

3.4.2 Ermittlung der thermischen Brennelementleistung

Normalbetriebsbedingungen

Aufgrund der Tatsache, dass TNT zur Leistungsberechnung der betrachteten Tracer-Brennelemente genutzt wird, folgt an dieser Stelle ein Vergleich mit der Leistungsberechnung des etablierten Programmpakets VSOP 99/09.

Die Leistungsberechnung unter Normalbetriebsbedingungen verläuft in VSOP und TNT unterschiedlich. In VSOP wird die gesamte Energiemenge, also die Energie, die unmittelbar mit der Spaltung verbunden ist, und die Energiemenge, die beim Zerfall der Spaltprodukte entsteht, direkt

und lokal freigesetzt. Dabei wird die nuklidspezifische Spaltenergie aus Tabelle 3.6 genutzt. Für weniger leistungsrelevante Nuklide wird nicht differenziert und mit einer Spaltleistung von 205,5 MeV gerechnet. In TNT dagegen wird die Leistung durch Summation der Energiefreisetzung aus den einzelnen Reaktionen berechnet.

Tabelle 3.6: Spaltenergien in VSOP 99/09

Nuklid	mittlere Energiefreisetzung pro Spaltung [MeV]
Pu-239	211,2
Pu-241	213,7
U-232	198,0
U-235	202,2
U-238	205,5
andere	205,5

Um einen Vergleich der beiden Leistungsberechnungsmethoden zu ermöglichen, wurde für ein willkürliches Tracer-Brennelement des HTR-Modul eine Abbrandrechnung mit TNT durchgeführt. Teilergebnis dieser Abbrandrechnung sind die Spaltraten aller spaltbaren Nuklide. Die Ergebnisse der vier Nuklide mit den höchsten Spaltraten sind in Abbildung 3.31 dargestellt. Aufgrund des mit der Zeit zunehmenden Abbrandes nimmt die Spaltrate von U-235 ab, wobei die Spaltraten der Plutoniumisotope, die nicht im Anfangsnuklidvektor vorhanden sind und sich im Laufe der Zeit aufbauen, zunehmen. Bedingt durch die Tatsache, dass das betrachtete Brennelement über unterschiedliche Wege durch das Core fließt, ist der zeitliche Verlauf des Neutronenflusses mit der das Kugelbrennelement abgebrannt wird, bei jedem Durchlauf unterschiedlich. Dies führt dazu, dass z. B. die maximale Spaltleistung von U-235 und U-238 im 11. Durchlauf die maximale Spaltleistung des vorherigen Durchlaufs übersteigt.

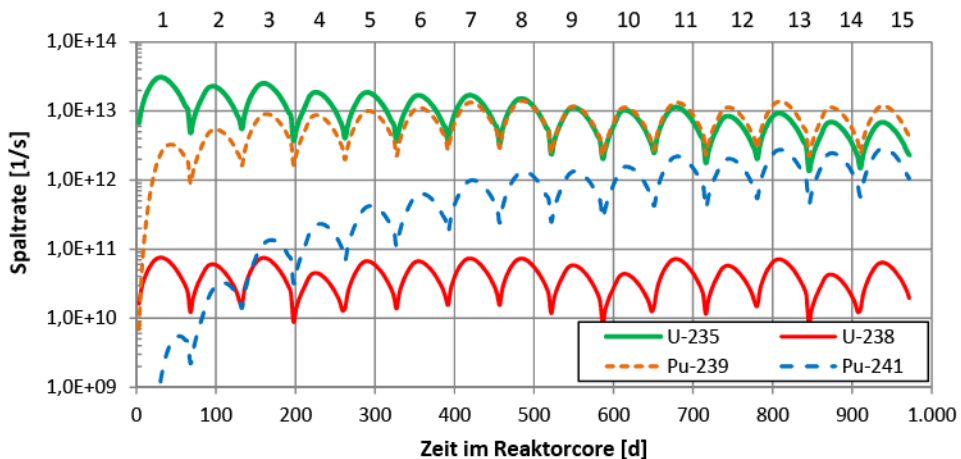


Abbildung 3.31: Mit TNT berechnete Spaltraten der vier Nuklide mit dem größten Anteil (Tracer-Brennelement des HTR-Modul)

Die Leistung nach dem VSOP-Formalismus berechnet sich durch Multiplikation aller Spaltraten mit den jeweiligen Spaltenergien aus Tabelle 3.6. Diese Ergebnisse sind der Leistungsberechnung aus TNT gegenübergestellt (siehe Abbildung 3.32). Beide Berechnungsmethoden liefern sehr ähnliche Resultate. In Bereichen mit einem hohen Neutronenfluss und demnach hoher Spaltrate ist die Leistung nach dem VSOP-Ansatz höher, während am Ende eines jeden Durchlaufs die Leistung nach dem TNT-Ansatz geringfügig höher ist.

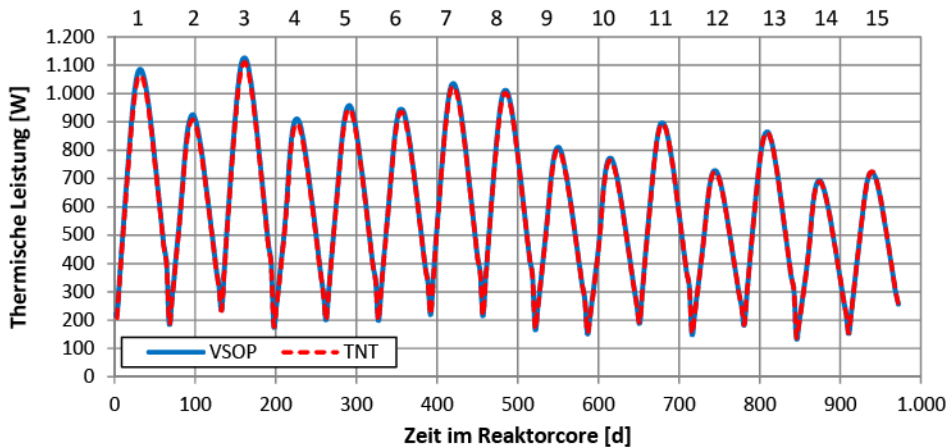


Abbildung 3.32: Vergleich der thermischen Leistung eines HTR-Modul-Brennelements mit gleicher Lebensgeschichte nach VSOP und TNT

Die einzelreaktionsbasierte Leistungsberechnung in TNT ist demnach als Teil der Kette zur Vorhersage der Freisetzungsraten unter Normalbetriebs- und Störfallbedingungen anwendbar. Die so berechnete Leistung kann also auch für die heterogene Brennelementtemperaturrechnung genutzt werden. Dabei wird in STACY nicht zwischen lokalen und nicht-lokalen Energiequellen unterschieden. Ein Teil der Energie, die in der Realität in der Umgebung des Brennelements freigesetzt wird, wird in der Rechnung vereinfachend komplett im Brennelement freigesetzt. Die Vereinfachung wird zum Teil durch den Austausch zwischen benachbarten Brennelementen kompensiert, wodurch der Netto-Austausch zwischen Brennelementen gering ist.

Vergleich der Nachzerfallsleistungsberechnung

In VSOP wird im Störfall für jede Batch die Nachzerfallsleistung nach DIN 25485 berechnet. Dabei werden unterschiedliche Beiträge berücksichtigt [DIN1990]:

1. Beitrag von U-239 und Np-239
2. Beitrag der Schwermetalle
3. Beitrag von Cs-134
4. Beitrag restlicher Aktivierungsprodukte
5. Beitrag übriger Spaltprodukte

Die Größenordnung der einzelnen Beiträge ist für den HTR-Modul in Abbildung 3.33 dargestellt. Zu sehen ist, dass die Nachzerfallsleistung der „übrigen Spaltprodukte“, die in DIN 25485 nicht weiter aufgeschlüsselt werden, dominiert.

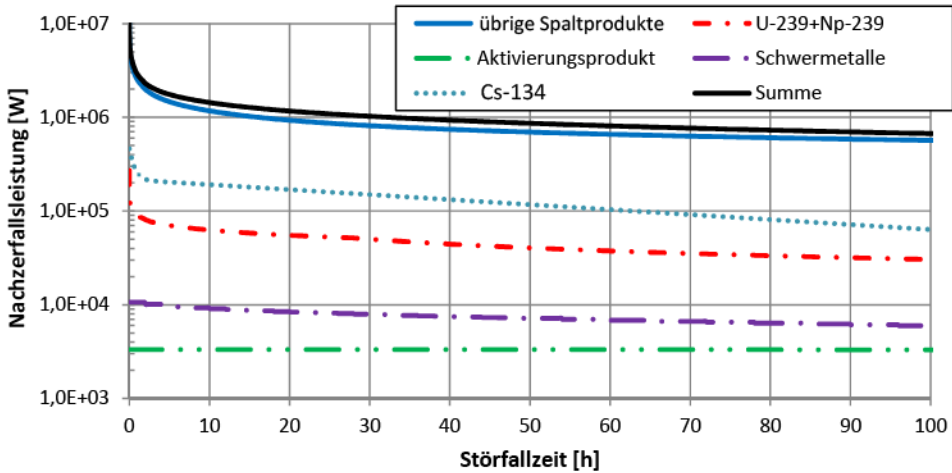


Abbildung 3.33: Beiträge zur Nachzerfallswärme, die in der DIN 25485 berücksichtigt werden (HTR-Modul, VSOP-Rechnung)

Laut [DIN1990, TEU1992] ist nur für eine OTTO-Beschickung nachgewiesen worden, dass die Abschätzung des Cs-134-Leistungsbeitrages konservativ ist. Daher soll an dieser Stelle die Nachzerfallsleistungsberechnung nach DIN mit der Berechnungsmethodik von TNT für den HTR-Modul verglichen werden.

Wie vorher beschrieben, werden in VSOP die Batches am Ende eines jeden Durchlaufs in der Regel vermischt. Das Vermischen der Batches aus unterschiedlichen Kanälen wird nicht von TNT vorgenommen, da dieses Programm lediglich den Abbrand eines vorgegeben Nuklidvektors berechnet. Das Vermischen müsste demnach extern durchgeführt werden. Um einen Vergleich der Nachzerfallsleistung der Batches zu ermöglichen, wurden die mit ORIGEN-JUEL 99/09 ermittelten Nuklidvektoren des HTR-Modul-Gleichgewichtscores als Eingangsvektoren für TNT genutzt. Die Länge dieses Nuklid-vektors hängt vom Abbrandzustand des Brennelements ab. Im Falle eines frischen Brennelements enthält der Vektor nur die Ausgangsnuklide und wird mit zunehmendem Abbrand sukzessive erweitert.

Im Vergleich zu der VSOP-internen Abbrandsimulation, in der nur die neutronisch relevanten Nuklide erfasst sind, werden in ORIGEN 1.020 Nuklide berücksichtigt. In ORIGEN-Juel 99/09 wird zwischen Strukturmaterialien, Aktiniden und Spaltprodukten unterschieden. Ein Aufsummieren der Nachzerfallsleistungen aller im Core befindlichen Batches ergibt die Nachzerfallsleistung des gesamten Cores. Abbildung 3.34 zeigt den Vergleich der Nachzerfallsleistung nach DIN 25485 und TNT.

Bei der Nachzerfallsberechnung nach DIN kann die Nachzerfallsleistung für jeden Störfallzeitpunkt direkt, d. h. ohne die Berechnung von vorliegenden Störfallzeitpunkten, aus der Leistungshistorie unter Normalbetriebsbedingungen berechnet werden. Das Verfahren ist somit nicht von einer Zeitschrittweite abhängig. Im Gegensatz dazu ist das Ergebnis der TNT-Rechnung von der gewählten Zeitschrittgröße abhängig (siehe Abbildung 3.34). Dies wird durch die Mittelung der thermischen Leistung zu Beginn und Ende eines Intervalls verursacht. Bei einer zu groß gewählten Zeitschrittweite wird die Nachzerfallsleistung zu Störfallbeginn somit deutlich überschätzt ($\Delta t = 0,125$ h). Bei einer Verkleinerung der Zeitschrittweite konvergiert die berechnete Nachzerfallsleistung. So sind die mit

einer Zeitschrittweite von 0,0125 h (45 s) und 0,0025 h (9 s, nicht dargestellt) berechneten Nachzerfallskurven identisch.

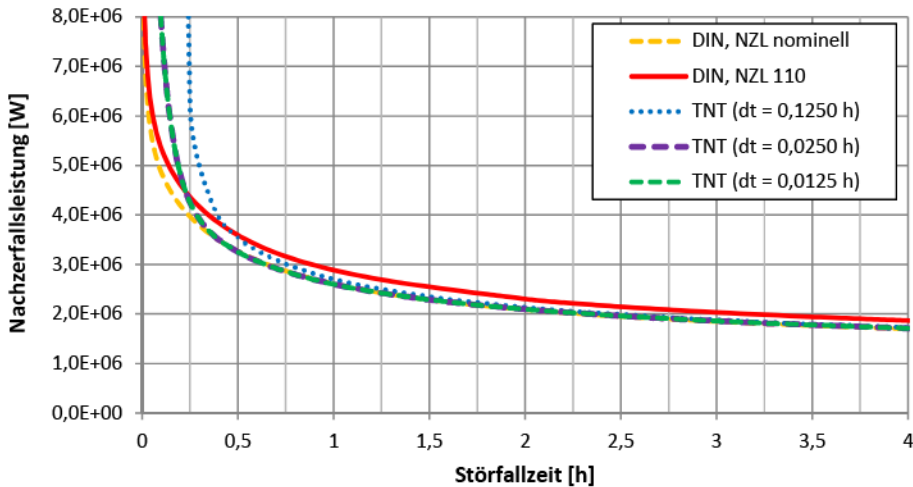


Abbildung 3.34: Vergleich der Nachzerfallsleistung nach DIN 25485 (VSOP) und TNT (NZL = Nachzerfallsleistung)

Die Berechnungsmethoden weisen für das gesamte Core sehr ähnliche Ergebnisse auf. Diese sind bei einer geringen Zeitschrittweite in der TNT-Berechnung nach einigen Stunden annähernd deckungsgleich mit der Norm. In den ersten Minuten nach Störfallbeginn führt die Berechnung der Nachzerfallsleistung nach Norm zu geringeren Werten im Vergleich zu TNT. Nichtsdestotrotz sind die zugrunde liegenden Eingabedaten mit Unsicherheiten behaftet. Damit auch diese abgedeckt werden, wird üblicherweise mit einem Sicherheitszuschlag von 10 % gerechnet. Dies entspricht in etwa zwei Standardabweichungen [RUE2012b].

Abbildung 3.35 zeigt die kumulierte Nachzerfallsenergie für verschiedene Rechenfälle. Wie vorher gezeigt, liegt die mit dem TNT-Formalismus berechnete Nachzerfallsleistung anfangs oberhalb sowohl der nominellen als auch der um 10 % erhöhten Nachzerfallsleistung nach DIN, wobei die TNT-Rechnung nach wenigen Stunden mit der DIN deckungsgleich ist. Dies lässt sich durch die Vielzahl an Nukliden, die in der TNT-Rechnung berücksichtigt werden, erklären. Kurzlebige Nuklide, die schnell zerfallen und unter Störfallbedingungen nur in geringem Maße neu erzeugt werden, liefern nur zu Störfallbeginn einen signifikanten Beitrag zur Nachzerfallsleistung. Diese Nuklide bleiben in den vereinfachten Ansätzen unberücksichtigt. Nur für Störfallzeiten unter fünf Stunden wird nach der TNT-Rechnung kumulativ eine geringfügig größere Energiemenge, bedingt durch den Zerfall der kurzlebigen Nuklide, freigesetzt. Danach wird die Rechnung durch die um 10 % erhöhte DIN-Rechnung konservativ abgedeckt, wobei die Kurve parallel zu der nach DIN berechneten Kurve verläuft. Dies hat zur Folge, dass die Brennelementtemperaturen lediglich am Anfang geringer ausfallen. In dieser Phase sind die Temperaturen ohnehin noch unkritisch, sodass die Temperaturen, die mit einem Leistungszuschlag von 10 % ermittelt wurden, als konservativ gelten können.

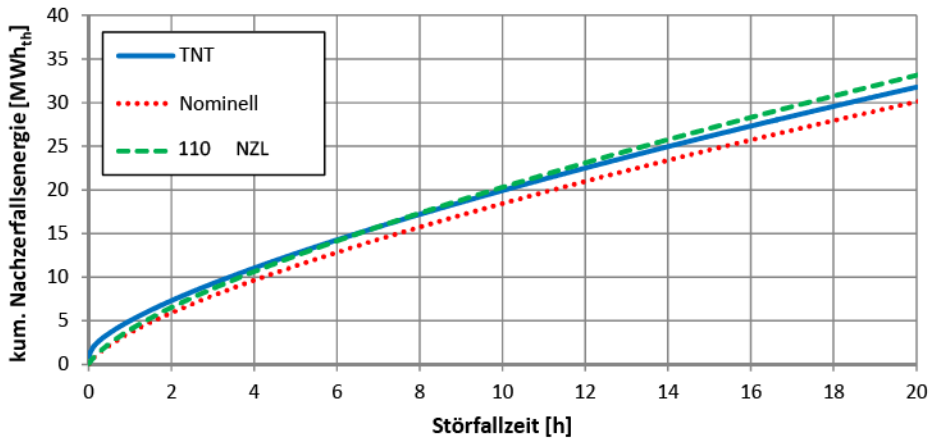


Abbildung 3.35: Kumulierte Nachzerfallsenergie seit Störfallbeginn nach DIN bei 100 (nominell) bzw. 110 Nachzerfallsleistung (NZL) im Vergleich zu TNT

Da allerdings zur Zeit die Norm in Genehmigungsverfahren gefordert wird, wurde im Rahmen dieser Arbeit zur Simulation der Nachzerfallsleistung ebenfalls mit der DIN-Norm gerechnet.

3.4.3 Berücksichtigung der räumlichen Selbstabschirmung

Für eine korrekte Beschreibung des Spaltproduktinventars als Eingabe der Freisetzungsrechnung muss die Selbstabschirmung berücksichtigt werden. In TNT wird derzeit noch die Abbrandrechnung für homogenisierten Brennstoff durchgeführt. Die Selbstabschirmung der Partikel führt zu einer Neutronenflussabsenkung, die bei der homogenisierten Rechnung durch einen Korrekturfaktor erfasst werden kann. Die Selbstabschirmung ist je nach Brennstoffanordnung unterschiedlich stark. Für die Brennstoffpartikel ist der Effekt der Selbstabschirmung nicht vernachlässigbar. Eine einfache volumengewichtete Homogenisierung der Brennstoffzone mit TRISO-Partikeln führt zu einer signifikanten Reduktion der Selbstabschirmung [KIM2004]. Ein Neutron, das einem Partikel bei einer bestimmten Energie entkommt, hat eine bestimmte Wahrscheinlichkeit, auf ein benachbartes Partikel zu treffen, ohne weiter moderiert zu werden. Hinzu kommt, dass diese Interaktion nicht nur innerhalb einer Kugel existiert, sondern auch zwischen benachbarten Kugeln (innere und äußere Dancoff-Korrektur). Der Dancoff-Faktor erfasst den geometrischen Effekt der Abschirmung von Brennstäben untereinander. Die Selbstabschirmung wird zunächst durch eine einfache Multiplikation der Neutronenflüsse in TNT berücksichtigt.

Ein HTR-Brennelement hat eine doppelt heterogene Struktur. Die erste Heterogenität wird durch die aus verschiedenen Schichten bestehende Partikelstruktur gebildet. Die zweite Heterogenität wird durch das Gefüge aus beschichteten Partikeln und dem umgebenden Matrixgraphit definiert. In einem vereinfachten homogenen Kugelmodell wird die Zusammensetzung des Brennelements als homogene Mischung betrachtet. In Abbildung 3.36 wird der Neutronenfluss in einem Ausschnitt des thermischen Energiebereichs eines Kugelmodells als homogenes Modell mit dem äquivalenten Modell, bei dem die Doppelheterogenität berücksichtigt ist, verglichen. Bei dieser Rechnung wurde eine Kugelschüttung mit einem mittleren Füllfaktor von 0,61 und Brennelementen mit jeweils 14.000 TRISO-Partikeln mit UO_2 -Brennstoff, untersucht. Der Unterschied zwischen der homogenen und der doppelt heterogenen Rechnung ist vor allem im niedrigen Energiebereich vorhanden.

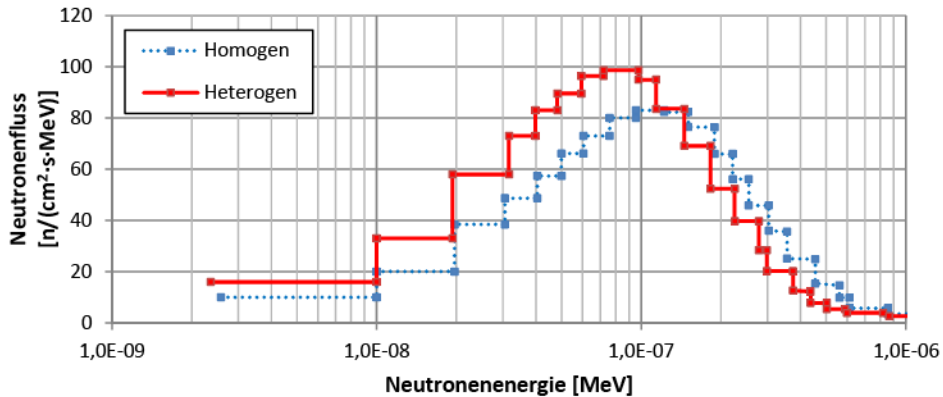


Abbildung 3.36: Vergleich des mit MCNP bestimmten Neutronenflusses eines heterogenen Modells mit seinem homogenen Gegenstück bei einer Systemtemperatur von 1.300 K [LI2010]

Das am FZJ entwickelte Rechenmodell TOTMOS löst die Neutronentransportgleichung in eindimensionaler Zylinder- und Kugelgeometrie über Stoßwahrscheinlichkeiten [BRO2010]. Weil der Spektralcode TOTMOS noch nicht mit dem HCP gekoppelt wurde, besteht auch noch nicht die Möglichkeit, die räumliche und energetische Selbstabschirmung im Detail zu beschreiben.

Die Selbstabschirmung wird im Rahmen dieser Studie durch einen einfachen Ansatz berücksichtigt. Durch eine Multiplikation aller neutroneninduzierten Prozesse mit einem sogenannten Nachteilfaktor, „disadvantage factor“, wird die Reaktionsrate dieser Prozesse verringert. Anstelle eines energieabhängigen Nachteilfaktors, der in Abbildung 3.37 exemplarisch für ein Brennelement des THTR dargestellt ist, wurde im Rahmen dieser Arbeit vereinfachend für den gesamten Energiebereich ein konstanter Wert angenommen. Diese Konstante muss für jedes Reaktormodell empirisch bestimmt werden.

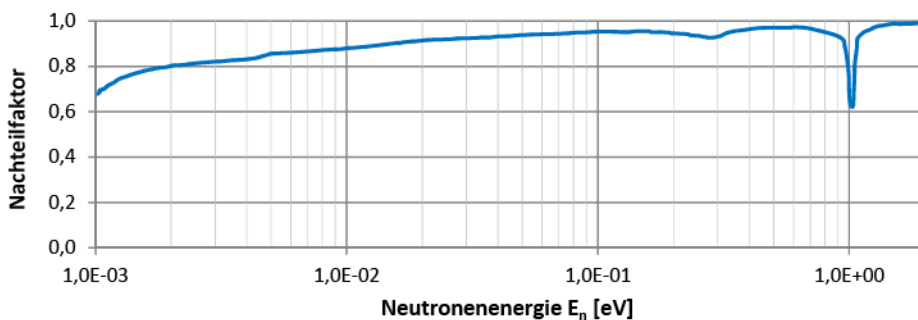


Abbildung 3.37: Nachteilfaktor eines THTR-Kugelbrennelements, simuliert mit KUGEL-THERMOS [BON1971] (überarbeitet)

Zur Bestimmung dieses Faktors wurde der Abbrand nach 15 Durchläufen für 500 Tracer-Brennelemente des HTR-Modul mit zufallsbasierten Wegen durch das Core bestimmt. Aufgrund der unterschiedlichen Wege ergibt sich bei vorgegebener nomineller Durchlaufzahl eine im Vergleich zu VSOP größere Verteilung der Endabbrände, die in Abbildung 3.38 (TNT = 1,0) dargestellt ist.

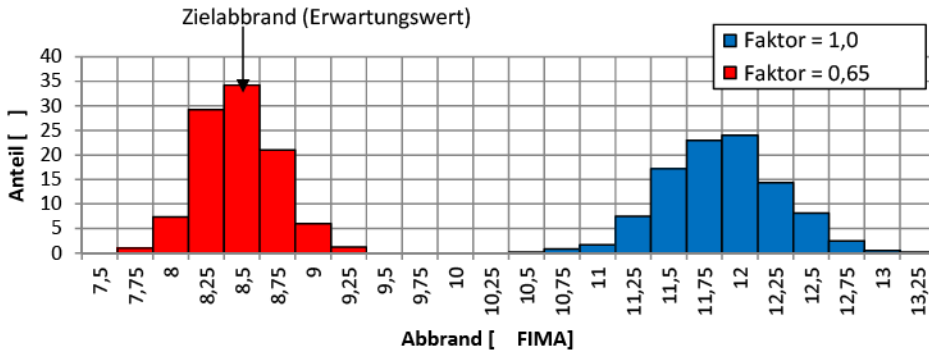


Abbildung 3.38: Anpassung des Mittelwertes einer mit TNT ermittelten Abbrandverteilung an den Erwartungswert (Verteilung jeweils über 500 Brennelemente des HTR-Modul)

Die gewählte Brennelementzahl resultiert in einer Verteilung ausreichender Qualität. Der Erwartungswert dieser Verteilung liegt aufgrund der Vernachlässigung der Selbstabschirmung, deutlich über dem vordefinierten Zielabbrand des HTR-Modul. Bei sonst gleichen Bedingungen sinken durch die Korrektur Endabbrand und Inventar der Nuklide, die vornehmlich durch Spaltung oder Neutroneneinfang gebildet werden. Durch iterative Bestimmung des Nachteilsfaktors werden sowohl die Nuklidinventare als auch der Endabbrand an die Sollwerte aus ORIGEN-Juel bzw. VSOP angeglichen. Da die Abbrandrechnungen rechenintensiv sind, wird ein Nachteilsfaktor bestimmt, der für alle betrachteten Nuklide den mittleren Endinventaren gut trifft. Es stellte sich heraus, dass bei einem Nachteilsfaktor von 0,65 der Zielabbrand im Durchschnitt sehr gut getroffen wird (siehe Abbildung 3.38). Beim Vergleich des ermittelten Nachteilsfaktors mit dem in Abbildung 3.37 gezeigten Verlauf erscheint der ermittelte Faktor plausibel, zumal der Verlauf für ein hoch angereichertes HTR-Brennelement ermittelt wurde. In Abbildung 3.39 sind die mittleren Endinventare für Sr-90, Cs-137 und I-131 für unterschiedliche Nachteilsfaktoren dargestellt.

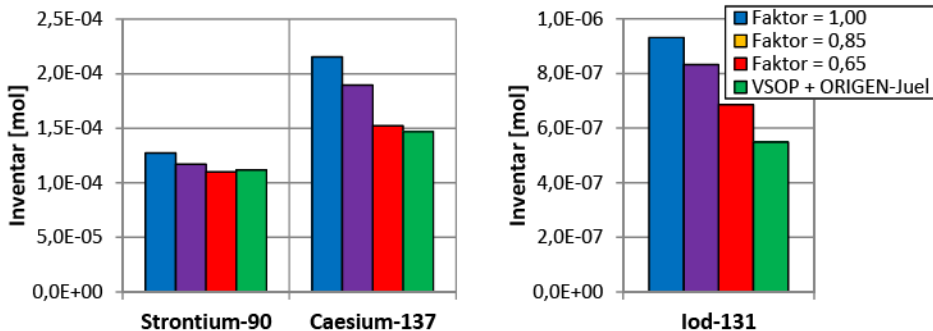


Abbildung 3.39: Mittleres Endinventar einiger ausgewählter Nuklide für verschiedene Nachteilsfaktoren in TNT im Vergleich zu ORIGEN-Juel 99/09 (Durchschnittswerte über 500 Brennelemente)

Auch hier werden die mittleren ORIGEN-Juel 99/09-Endinventare bei einem Multiplikationsfaktor von 0,65 für Sr-90 und Cs-137 sehr gut getroffen. Lediglich das I-131-Inventar wird um etwa 15 überschätzt. Auch wenn diese Lösung nicht der endgültigen Lösung im HCP entspricht, ist die Wahl eines Faktors von 0,65 eine gute erste Näherung.

3.5 Bestimmung der Gesamtfreisetzungsrates eines Kugelhaufencores

Die Gesamtfreisetzungsrates des Cores (FR_{Core}) wird aus den Freisetzungsrates der repräsentativen Tracer-Brennelemente bestimmt. Drei Mittelungsmethoden werden untersucht, um die Gesamtfreisetzungsrates aller Brennelemente im Core zu berechnen. Die drei unterschiedlichen in STACY vorgesehenen Methoden sind:

1. **Core gemittelt:** Bei der Mittelung über das gesamte Core werden die Freisetzungsrates der einzelnen Brennelementkugeln ohne Berücksichtigung des Aufenthaltsorts gemittelt. Jedes Brennelement hat das gleiche Gewicht in der Mittelwertbildung. Abschließend wird die mittlere Freisetzungsrates pro Tracer-Brennelement mit der Anzahl Brennelemente im Core skaliert. Diese Berechnung lässt sich für jedes Nuklid wie folgt schreiben:

$$FR_{Core}(t) = \frac{\sum_{i=1}^{n_{TB}} FR_i(t)}{n_{TB}} \cdot n_{B,Core} \quad 3.11$$

mit: FR_i - Freisetzungsrates eines Tracer-Brennelements „i“ [mol/s]
 n_{TB} - Anzahl an Tracer-Brennelementen im Core
 $n_{B,Core}$ - Anzahl an Brennelementen im Core

2. **Region gemittelt ohne Korrektur:** Die berechneten Freisetzungsrates werden zuerst für jede Region gemittelt. Bei dieser Methode werden alle Brennelemente in einer Region gleichwertig behandelt und arithmetisch über alle Brennelemente gemittelt. Wie aber in Abschnitt 3.3 gezeigt, können leichte Unterschiede bei den Kugelanzahlen, die nach der Durchlaufzahl sortiert sind, auftreten. Diese Unterschiede werden bei dieser Methode nicht korrigiert. Im zweiten Schritt werden die über die einzelnen Regionen gemittelten Freisetzungsrates volumengewichtet in eine mittlere Freisetzungsrates je Tracer-Brennelement überführt. Abschließend wird diese Größe mit der Gesamtanzahl an Brennelementen in die Gesamtfreisetzungsrates des Core skaliert. Diese Berechnung lässt sich für jedes Nuklid wie folgt schreiben:

$$FR_{Core}(t) = \sum_j \frac{V_{Reg,j}}{V_{Core}} \left(\frac{\sum_{i=1}^{n_{TB,Reg,j}} FR_i(t)}{n_{TB,Reg,j}} \right) \cdot n_{B,Core} \quad 3.12$$

mit: FR_i - Freisetzungsrates eines Tracer-Brennelements „i“ [mol/s]
 $n_{TB,Reg,j}$ - Anzahl an Tracer-Brennelemente in Region „j“
 n_{Reg} - Anzahl Regionen im Kugelhaufen
 $V_{Reg,j}$ - Volumen der Region „j“ [m³]
 V_{Core} - Volumen aller Kugelhaufenregionen [m³]

3. **Region gemittelt mit Korrektur:** Die dritte Vorgehensweise ist vergleichbar mit der zweiten Methode. Allerdings wird der Einfluss der geringen Unterschiede bei den Kugelanzahlen dadurch kompensiert, dass zunächst nur über die Tracer-Brennelemente mit der gleichen Durchlaufzahl summiert wird und anschließend über die daraus resultierenden Freisetzungsrates volumengewichtet gemittelt wird.

Die mit Hilfe der drei Methoden berechneten Cs-137-Freisetzungsraten für das gesamte Core des HTR-Modul sind in Abbildung 3.40 dargestellt. Die Abbildung zeigt, dass die berechneten Freisetzungsraten, ab dem Zeitpunkt, an dem das Gleichgewichtscore erreicht wird, sehr vergleichbar sind. Im Vergleich zu anderen Unsicherheiten in der Freisetzungsrechnung, wie z. B. die Diffusionskoeffizienten, sind die Unterschiede vernachlässigbar.

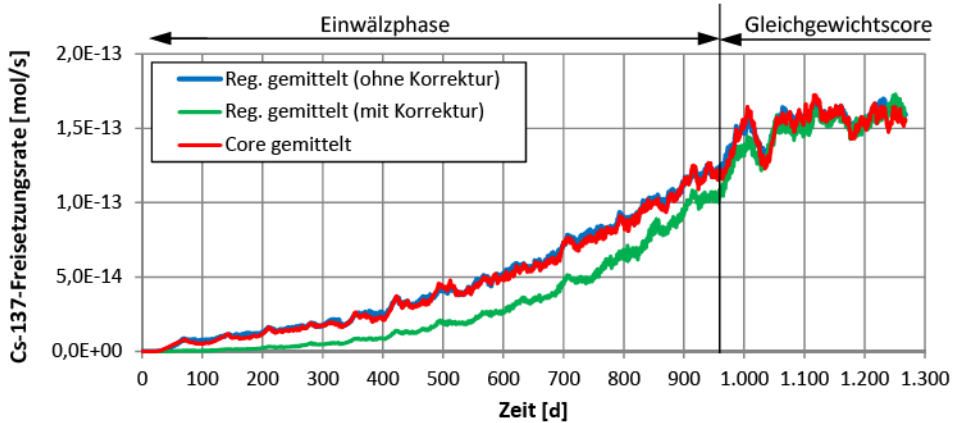


Abbildung 3.40: Vergleich der drei verschiedenen Methoden bei der Bestimmung der Cs-137-Freisetzungsrates für das gesamte Core des HTR-Modul

Eine weitere Analyse soll zeigen, dass die berechneten Freisetzungsrates ab dem Zeitpunkt, an dem das Gleichgewichtscore erstmalig erreicht wird, über verschiedene Zyklen näherungsweise konstant sind. Abbildung 3.41 zeigt exemplarisch für Cs-137 die Freisetzungsrates aus dem Gleichgewichtscore des HTR-Modul über vier Zyklen.

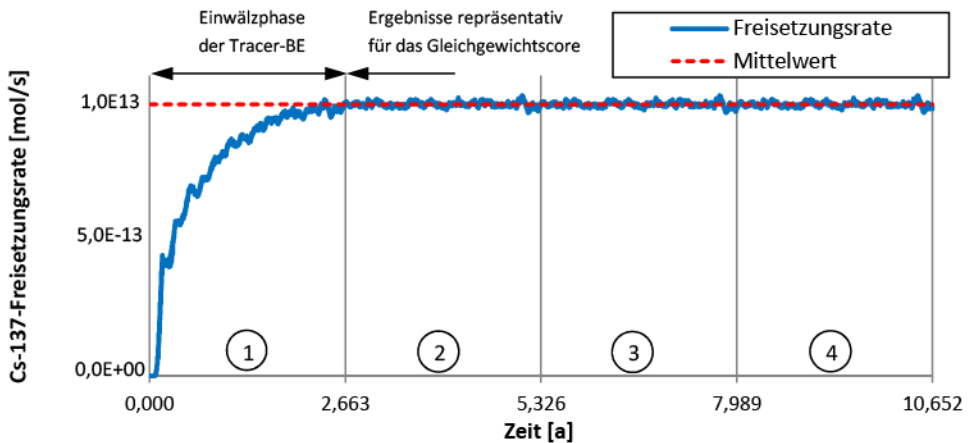


Abbildung 3.41: Cs-137-Freisetzungsrates über vier komplette Zyklen für den HTR-Modul (STACY Spaltproduktfreisetzungsrechnung nach Methode 2)

Ein Zyklus ist die Zeit, die ein Tracer-Brennelement im Durchschnitt benötigt, um den Zielabbrand zu erreichen und endgültig ausgeschleust zu werden. Zu Beginn des ersten Zyklus sind keine Tracer-Brennelemente im Core, demnach ist die Gesamtfreisetzungsrate Null. Wie vorher beschrieben, werden die Tracer-Brennelemente mit konstanter Zufuhr rate zugegeben. Am Ende des ersten Zyklus wird zum ersten Mal der Zielabbrand bei einem entladenen Brennelement festgestellt. Ab diesem Zeitpunkt liegen die Tracer-Brennelemente stochastisch verteilt über das gesamte Core vor, so dass deren Gesamtfreisetzungsrate repräsentativ für das Gleichgewichtscore ist. Bis auf geringe Schwankungen verhält sich die berechnete Gesamtfreisetzungsrate auch bei weiterem Umwälzen von Tracer-Brennelementen stabil (siehe Abbildung 3.41).

Aufgrund der zufallsbedingten Wege der Tracer-Brennelemente durch das Core fluktuieren die Simulationsergebnisse bei geringen Brennelementanzahlen erheblich. Mit jeder weiteren Erhöhung der Brennelementanzahl im Gleichgewichtscore, verringern sich die Fluktuationen. Eine Reihe von Rechnungen mit unterschiedlichen Brennelementanzahlen wurde durchgeführt, um festzustellen, bei welcher Anzahl keine Abhängigkeit des Ergebnisses von der Brennelementanzahl mehr gegeben ist. In Abbildung 3.42 sind die Freisetzungsraten für unterschiedliche Brennelementanzahlen unter Normalbetriebsbedingungen dargestellt.

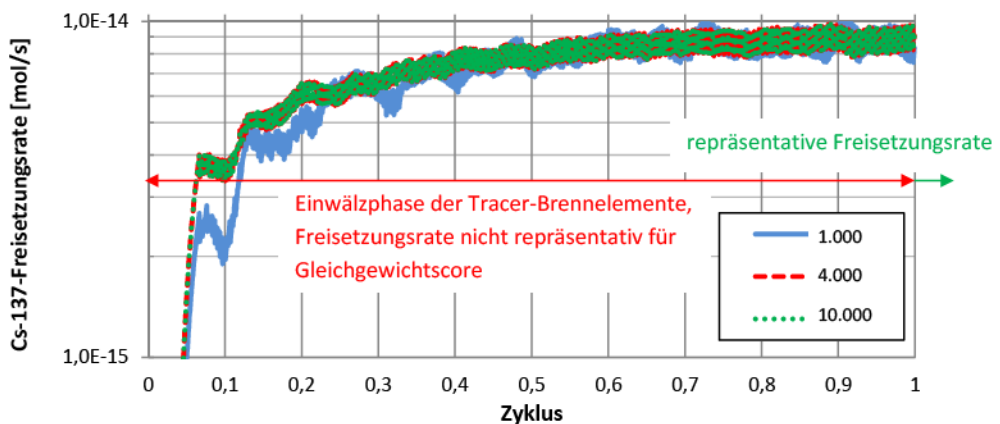


Abbildung 3.42: Einfluss der Anzahl an Tracer-Brennelementen auf die Cs-137-Freisetzungsrate aller Brennelemente im HTR-Modul-Core (Methode 2)

Abbildung 3.42 zeigt, dass die Rechnung mit 4.000 Tracer-Brennelementen deckungsgleich mit den Freisetzungsraten bei 10.000 Tracer-Brennelementen ist. Die berechnete Freisetzungsrate bei 1.000 Brennelementen weicht nur in der Einwühlphase marginal ab. Da die Einwühlphase nicht die Einbrennphase beschreibt, sind die Rechenergebnisse während dieser Phase bedeutungslos. Eine weitere Erhöhung der Anzahl führt zu keiner nennenswerten Änderung der Freisetzungsraten des Gleichgewichtscore.

3.6 Simulation der Spaltproduktablagerung auf Reflektoren

In den vorherigen Abschnitten wurde die Spaltproduktfreisetzung der Brennelemente im Kugelhafen diskutiert. Über den Kugelhafen hinaus gibt es Bereiche innerhalb des Reaktordruckbehälters, in denen Spaltprodukte abgelagert bzw. wieder vom Kühlgas aufgenommen werden können. Experimente haben gezeigt, dass der Deckenreflektor, je nach Störfallverlauf, einen

es gelangen keine Spaltprodukte über die äußere Fläche hinaus. Damit kann in radialer Richtung kein Austausch zwischen den Reflektormaschen stattfinden. Diese Vereinfachung ist zulässig, da das Konzentrationsgefälle zwischen benachbarten Reflektormaschen nicht stark ausgeprägt ist. Des Weiteren werden die Spaltprodukte wegen der relativ niedrigen Temperaturen im Normalbetrieb nicht in den hier relevanten Zeiträumen bis zur benachbarten Bohrung diffundieren.

Der Bodenreflektor kann in FRESCO-I nur als Scheibe abgebildet werden, wodurch die realen Verhältnisse nur grob erfasst werden können (siehe Abbildung 3.43). In STACY wird der Ansatz übernommen, der auch in anderen HTR-Rechenprogrammen gewählt worden ist, in denen die Schräge des Bodenreflektors als Treppenfunktion abgebildet wird. Jede Masche im Gitter gehört entweder vollständig zum Reflektor oder zum Kugelhaufen. Durch eine Gitterverfeinerung kann die Geometrie des Reflektors besser abgebildet werden.

In Abhängigkeit der Strömungsverhältnisse und Sorptionsisothermen⁴ werden sich Spaltprodukte auf den Innenflächen der Bohrungen des Decken- und Bodenreflektors ablagern und in die Reflektoren hinein diffundieren. Die komplexe dreidimensionale Geometrie des Decken- und Bodenreflektors wird vereinfacht durch Maschen abgebildet (siehe Abbildung 3.44). Zur Simulation des Ablagerungsverhaltens enthält jede Masche einen Hohlzylinder, wobei dessen Volumen das gesamte Feststoffvolumen repräsentiert.

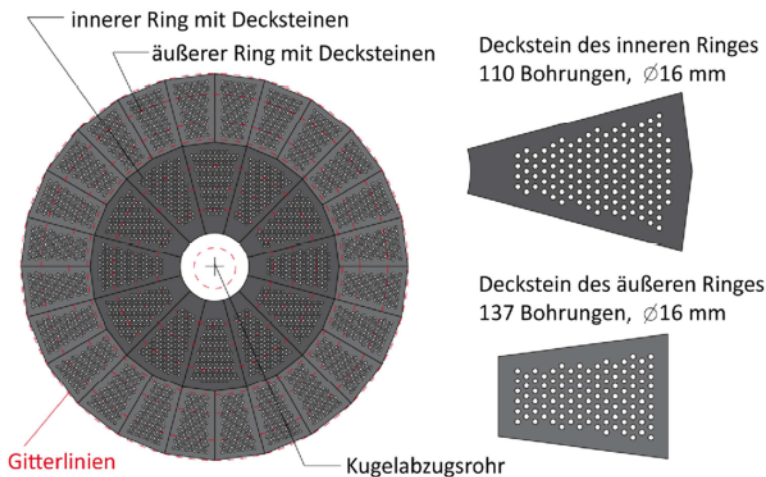


Abbildung 3.44: Bodenreflektor des HTR-Modul in der Draufsicht mit eingeblendeten Gitterlinien des Maschennetzes (eigene Darstellung)

Der innere Radius einer solchen Reflektorbohrung berechnet sich nach folgender Gleichung:

$$R_{i, \text{Refl}} = \frac{D_{\text{Hyd}}}{2} \quad 3.13$$

mit: D_{Hyd} - hydraulischer Durchmesser [m]

⁴ Sorptionsisothermen beschreiben den Gleichgewichtszustand der Sorption eines Stoffes bei konstanter Temperatur.

Die Anzahl der Bohrungen in der Masche berechnet sich nach folgender Gleichung:

$$n_{\text{Bohrung}} = \frac{A_{\text{Grund}} \cdot \epsilon_{\text{Refl}}}{\pi \cdot R_{i,\text{Refl}}^2} \quad 3.14$$

mit: A_{Grund} - Grundfläche der Masche $[\text{m}^2]$
 ϵ_{Refl} - mittlerer Leervolumenanteil im Reflektor

Obige Gleichung lässt sich aus einer einfachen Leervolumenbetrachtung ableiten. Nachdem Innenradius und Bohrungsanzahl festgelegt sind, muss der Außenradius so bemessen sein, dass das vorgegebene Festvolumen der Masche eingehalten wird. Der äußere Radius des Hohlzylinders berechnet sich demnach nach folgender Gleichung:

$$R_{o,\text{Refl}} = \frac{R_{i,\text{Refl}}}{\sqrt{\epsilon_{\text{Refl}}}} \quad 3.15$$

3.7 Umverteilung der Spaltprodukte mit dem Kühlgas

Die aus den Brennelementen freigesetzten Spaltprodukte werden im Core mit der Konvektionsströmung des Kühlgases sowie durch Diffusion im Helium umverteilt. An kälteren Stellen des Cores bzw. des Primärkreises können Spaltprodukte wieder abgelagert werden. Zur Simulation dieser Umverteilung wird die kombinierte Diffusions- und Konvektionsgleichung im Zylinderkoordinaten gelöst. Die Betrachtung von Tracer-Brennelementen führt dazu, dass Freisetzungsraten nur an deren Positionen, d. h. lokal vorliegen. Die begrenzte Zahl an Tracer-Brennelementen hat jedoch zur Folge, dass es Feinmaschen geben kann, in denen kein Brennelement vorliegt. An diesen Stellen würde somit auch keine Freisetzungsraten ermittelt werden. Aus diesem Grund besteht die Notwendigkeit, die mittleren Freisetzungsraten für größere Kontrollvolumina zu bestimmen. Demnach wird für jede Region eine mittlere Spaltproduktfreisetzungsraten berechnet. Der Gesamtprozess der Umverteilungsrechnung ist in Abbildung 3.45 dargestellt.

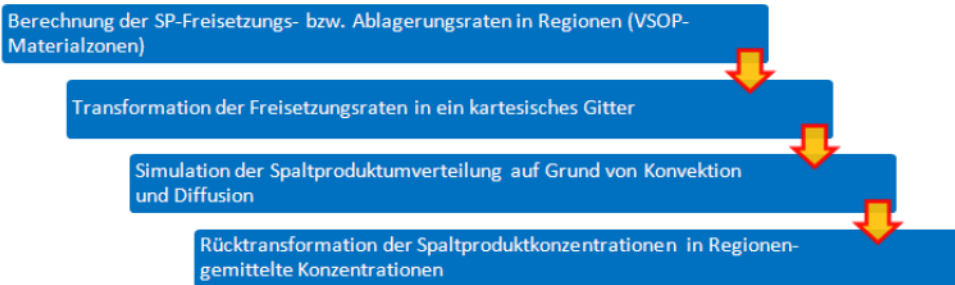


Abbildung 3.45: Ablauf der Simulation der Spaltproduktumverteilung im Reaktorcore

Wie in Abschnitt 3.2 im Detail besprochen, wird ein Gitter in Zylinderkoordinaten für die fluiddynamische Rechnung und die Neutronendynamik genutzt, zur Aufnahme der Batches jedoch ein davon abweichendes Gitter. In STACY wird eine Transformationsmatrix generiert, die eine Transformation der Daten von einem Gitter in das andere ermöglicht. Diese Matrix enthält die

Informationen darüber, zu welchem Teil jeder Region welche Maschen gehören und umgekehrt. Eine Beschreibung des Algorithmus ist in Anhang 13 zu finden. Die Matrix wird u. a. zur Transformation der Region-gemittelten Spaltproduktkonzentrationen herangezogen. Der mittlere Spaltprodukt-quellterm in einer Masche berechnet sich nach folgender Gleichung:

$$\bar{Q}_{SP,j} = \frac{\sum_{i=1}^{n_{Reg}} \dot{Q}_{SP,Reg,i} \cdot V_{Region,i} \cdot X_{i,j}}{V_{Masche,j}} \quad 3.16$$

mit:	n_{Reg}	- Anzahl Regionen, die (teilweise) zur Masche gehören	
	$V_{Region,i}$	- Gesamtvolumen der Region „i“	$[m^3]$
	$\dot{Q}_{SP,Reg,i}$	- Spaltproduktuellterm der Region „i“	$[mol/s]$
	$X_{i,j}$	- Anteil der Region „i“ an Masche „j“	
	$V_{Masche,j}$	- Gesamtvolumen der Masche	$[m^3]$

Mit den maschenbasierten Spaltproduktuell- und -senkentermen kann die Umverteilung berechnet werden. Bei dem Finiten-Volumenverfahren wird das Spaltproduktinventar jeder Masche bilanziert. Für den konvektiven Anteil des Spaltprodukttransports kommt das „Upwind“-Differenzenverfahren zum Einsatz. Bei diesem Verfahren pflanzen sich Störungen nur in Strömungsrichtung fort, wie dies in der Realität bei Strömungen geringer Geschwindigkeit der Fall ist. Im Gegensatz zu anderen Verfahren werden Differenzen nur aus der Richtung gebildet, aus der die Strömung kommt. Bei dem gewählten mathematisch konservativen Lösungsverfahren gehen keine Teilchen aufgrund der Numerik verloren. Des Weiteren ist die Lösung, bedingt durch das voll implizite Verfahren, unabhängig von der gewählten Zeitschrittweite stets stabil [KRO1982]. Eine Folge ist allerdings, dass die zu berechnenden Spaltproduktkonzentrationen sich nicht unabhängig voneinander bestimmen lassen und ein Gleichungssystem gelöst werden muss. Das gewählte Verfahren ist somit zeitintensiv. Obwohl die Spaltproduktumverteilung schon in FRESKO-I berücksichtigt wurde, konnten einige in der Programmbeschreibung [KRO1982] erwähnte Funktionalitäten im Quellcode nicht gefunden werden. So wurde die Beschreibung der Spaltprodukt diffusion im Kühlgas im Quellcode nicht vorgefunden. Der Ansatz aus FRESKO-I wurde daher aufgegriffen und vervollständigt. Als Teil von STACY wurde der Algorithmus komplett neu implementiert.

Der Spaltprodukttransport im Helium wird numerisch durch eine Bandmatrix, bei der nur die Haupt- und Nebendiagonale und zwei weitere Diagonalen besetzt sind, beschrieben. Die Diffusions- und Konvektionsvorgänge lassen sich durch folgende Gleichung beschreiben:

$$\Delta Inv_{Ges} = \Delta Inv_{Konv,i,j} + \Delta Inv_{Diff,i,j} + \Delta Inv_{Q,i,j} + \Delta Inv_{\lambda,i,j} \quad 3.17$$

In dieser Gleichung wird die Gesamtänderung des Inventars durch einen konvektiven und diffusen Transportterm, eine innere Quelle (bzw. Senke) und eine zerfallsbedingte Inventarverringerung beschrieben. Die Bilanzierung einer Zelle ist in Abbildung 3.46 dargestellt. Die mathematische Modellierung ist in Anhang 14 dargestellt. Dabei wird für jede Masche eine separate Gleichung aufgestellt. In der Rechnung wird jede Masche homogenisiert betrachtet. So werden in einer Reflektormasche die Kanäle im Reflektor nicht einzeln abgebildet, sondern vereinfacht durch Gesamtvolumen und Leerraumfaktor definiert. Dieser Ansatz ist vergleichbar mit der Vorgehensweise bei fluiddynamischen Rechnungen. Die Lösung des Gleichungssystems erfolgt durch das Gauß'sche Eliminationsverfahren.

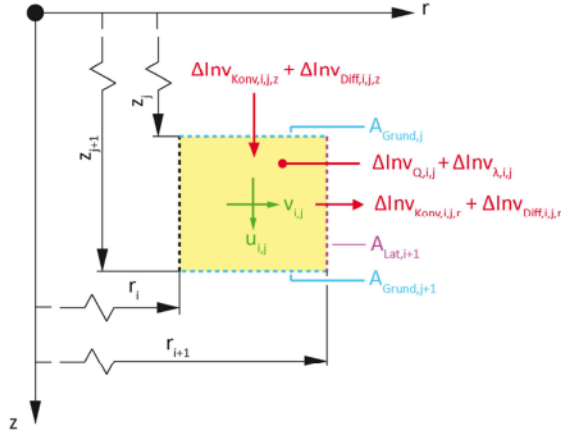


Abbildung 3.46: Bilanzierung des Spaltproduktinventars im Kühlgas innerhalb einer Masche (eigene Darstellung)

Die Diffusion von Spaltprodukten in das Kühlmedium setzt sich aus zwei Anteilen zusammen, einem von der Kühlmittelströmung unabhängigen Anteil sowie einem zweiten, der durch die Strömung beeinflusst wird. Diese Dispersion findet nur bei einer Strömung des Mediums statt. Sie wird durch lokale Abweichungen von der mittleren Strömung bewirkt und beschreibt die Wirkung kleinskaliger Fluktuationen im Strömungsfeld [BER1988]. Dispersion ist immer anisotrop. Beide Anteile können durch die Fick'sche Diffusionsgleichung beschrieben werden [KIN2010].

Im allgemeinen Fall, bei dem die Strömungsrichtung nicht mit einer der Hauptachsen des Rechengitters zusammenfällt, wird der dispersive Anteil durch einen Dispersionstensor folgender Form beschrieben [KIN2010]:

$$\begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{pmatrix} \quad 3.18$$

wobei die unterschiedlichen Koeffizienten wie folgt definiert sind [KIN2010]:

$$D_{xx} = \alpha_L \cdot \left(\frac{v_x^2}{v_{abs}} \right) + \alpha_T \cdot \left(\frac{v_y^2}{v_{abs}} \right) \quad [m^2/s] \quad 3.19$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \cdot \left(\frac{v_x \cdot v_y}{v_{abs}} \right) \quad [m^2/s] \quad 3.20$$

$$D_{yy} = \alpha_L \cdot \left(\frac{v_y^2}{v_{abs}} \right) + \alpha_T \cdot \left(\frac{v_x^2}{v_{abs}} \right) \quad [m^2/s] \quad 3.21$$

mit: α_L - longitudinale Dispersivität $[m^2/s]$
 α_T - transversale Dispersivität $[m^2/s]$

In der Rechnung wird die Annahme getroffen, dass während des Normalbetriebs reines Helium von oben in das Core einströmt. In der VSOP-Rechnung wird bei einem Druckentlastungsstörfall davon ausgegangen, dass der Druck im Primärkreis sofort auf den Umgebungsdruck abfällt. Während des

Störfälle wird keine Konvektionsrechnung durchgeführt. Es liegen somit keine Geschwindigkeiten vor, die für die Berechnung der Umverteilung der Spaltprodukte im Störfall benötigt würden. Aktivitätsmessungen bei realen Anlagen, die mit modernen Brennelementen betrieben wurden, zeigen, dass die kühlgasgetragene Aktivität im Primärkreis sehr niedrig ist [VDI1989, WU2002]. Damit erscheint diese Annahme gerechtfertigt. Durch die im Normalbetrieb hohe Strömungsgeschwindigkeit lagert sich im Normalbetrieb eine geringe Spaltproduktmenge in dem Deckenreflektor ab.

Rücktransformation der Konzentrationen

Nach der Berechnung der Umverteilung werden die daraus resultierenden Spaltproduktkonzentrationen im Kühlgas nach folgender Vorschrift in das Regionengitter überführt:

$$\bar{C}_{SP,Reg,j} = \frac{\sum_{i=1}^{n_{Masche}} C_{SP,Masche,i} \cdot V_{Masche,i} \cdot X_{j,i}}{V_{Region}} \quad 3.22$$

mit: $C_{SP,Masche,i}$ - Spaltproduktkonzentration in der Masche „i“ [mol/m³]
 $V_{Masche,i}$ - geometrisches Maschenvolumen [m³]
 $X_{j,i}$ - Anteil der Masche „i“ an Region „j“
 $\bar{C}_{SP,Reg,j}$ - Mittlere Spaltproduktkonzentration der Region „j“ [mol/m³]

Diese Transformation ist der letzte Schritt der in Abbildung 3.45 gezeigten Berechnungskette. Hiernach fängt ein neuer Zeitschritt an.

Die in den letzten Abschnitten vorgestellten Berechnungsmodelle ermöglichen eine räumlich aufgelöste Freisetzungsberechnung bei einem Kugelhaufenreaktor. In Kapitel 4 wird die Freisetzungsberechnung am Beispiel des HTR-Modul durchgeführt.

3.8 Freisetzungsberechnung bei HTR mit prismatischen Brennelementen

In den letzten Abschnitten wurde die Kette zur Berechnung von räumlich aufgelösten Spaltproduktfreisetzungsraten bei Kugelhaufenreaktoren vorgestellt. Prinzipiell ist der Ansatz übertragbar auf HTR mit prismatischen Brennelementen.

Voraussetzung für eine solche Freisetzungsberechnung ist eine gekoppelte Neutronik- und Abbrandrechnung, welche für Kugelhaufenreaktoren mit VSOP erfolgt. Im Prinzip kann diese Rechnung mit VSOP auch für HTR mit prismatischen Brennelementen durchgeführt werden. Diese Vorgehensweise ist allerdings mit einigen Nachteilen verbunden. Die Brennstoffelemente eines HTR mit prismatischen Brennelementen werden üblicherweise mit abbrennbaren Neutronengiften ausgestattet, um die Leistungsverteilung zu verbessern und damit die Leistungs- bzw. Temperaturspitzen zu verringern. Auch der HTR verfügt über sogenannten „Sticks“ mit abbrennbarem Neutronengift. Diese lokal sehr hohen Konzentrationen an abbrennbaren Giften (Bor), die die Neutronik maßgebend beeinflussen, können durch VSOP nicht im Detail erfasst werden, da in VSOP das Nuklidinventar dieser Sticks über größere Bereiche homogenisiert wird. Die lokalen Neutronenflussdepressionen und der hohe Neutronenflussgradient über ein Brennelement werden demnach durch VSOP nicht korrekt abgebildet und führen zu einer Abweichung in der Leistungs- und damit Inventarverteilung [OUG2010, WAN2012]. Somit muss die Berechnungskette für HTR mit prismatischen Brennelementen angepasst werden.

Anstelle von VSOP wird im Rahmen dieser Arbeit Serpent zur Modellierung von HTR mit prismatischen Brennelementen genutzt. Serpent ist ein Monte-Carlo-Neutronikcode mit integrierter Abbrandrechnung. Separate TNT-Rechnungen, wie sie beim Kugelhaufenreaktor benötigt werden, sind damit nicht nötig.

Abbildung 3.47 zeigt, wie Serpent mit STACY im Rahmen dieser Arbeit gekoppelt wurde. Zur Berechnung der zeitlichen Verläufe der Nukliddichten wird eine Serpent-Rechnung durchgeführt. Für die Rechnung werden die Geometrie, die Nukliddichten des frischen Cores und die Fahrweise als Eingabe benötigt. Teil der Serpent-Ausgabe sind die zeitlichen Verläufe der Nukliddichten, des Abbrandes und des schnellen Neutronenfluss für jedes Brennelement. Diese werden von STACY aus der Serpent-Ausgabe extrahiert. Mit Hilfe dieser Eingabedaten und der Definition von freisetzungsspezifischen Eingaben wird von STACY die Spaltproduktfreisetzungsrechnung durchgeführt.

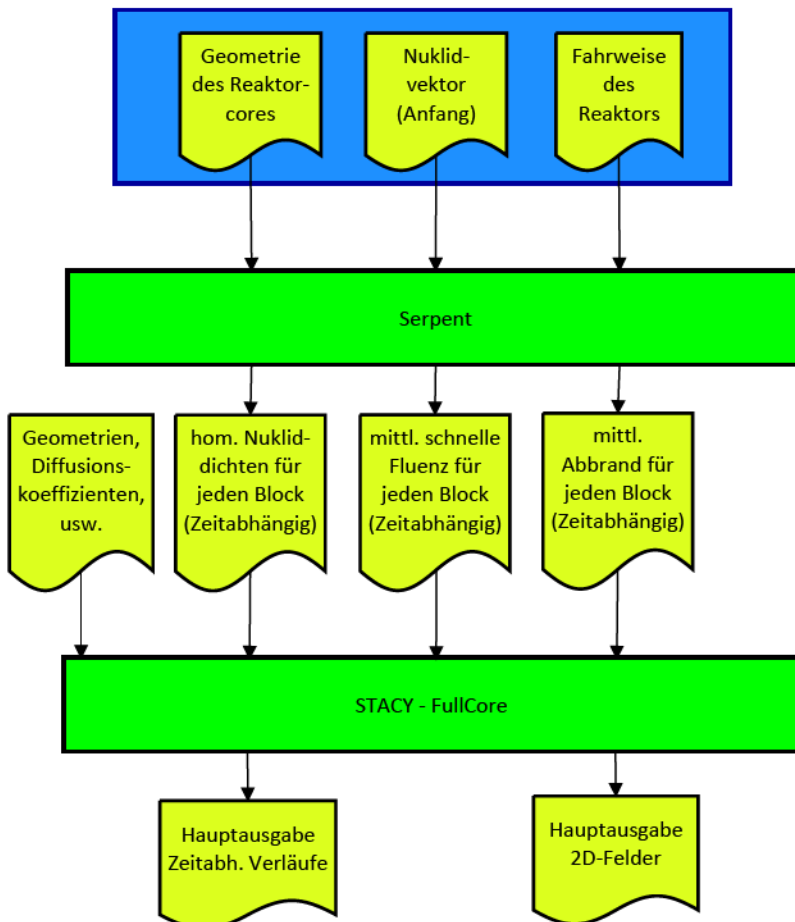


Abbildung 3.47: Kopplung zwischen Abbrand (Serpent) und Spaltproduktfreisetzungsrechnung (STACY)

4 HTR-Modul-Anlagenrechnung

In diesem Kapitel wird die in Kapitel 3 vorgestellte Berechnungskette genutzt, um die Spaltprodukt-freisetzung unter Normalbetriebsbedingungen, als auch während der Kernaufheizphase nach einer schnellen Druckentlastung des Primärkreises beim HTR-Modul zu quantifizieren.

4.1 Berechnung des Gleichgewichtscores und Temperaturen im Druckentlastungsstörfall

4.1.1 Berechnung des Gleichgewichtscores

Zur Berechnung der Spaltproduktfreisetzung in Betrieb und während des Kernaufheizstörfalls wird eine Core-Auslegungsrechnung mit VSOP benötigt. Im Allgemeinen wird dabei von einem Gleichgewichtscore ausgegangen, das sich durch eine zeitlich unveränderte Nuklidzusammensetzung in jedem raumfesten Volumenelement kennzeichnet. Dieses Gleichgewichtscore stellt sich bei konstanten Betriebsparametern, wie z. B. konstanter Beschickungsrate der Brennelement und Vollastbetrieb asymptotisch ein [SIE1987].

Die Auslegung des Gleichgewichtscores kann zunächst ohne eine detaillierte Betrachtung der „Einbrennphase“ erfolgen. Erst in einem weiteren Schritt wird dann die Einbrennphase festgelegt, während der das frische Core asymptotisch in das Gleichgewichtscore überführt wird. Damit wird der Nachweis erbracht, dass das Gleichgewichtscore ohne eine Verletzung von z. B. maximalen Brennstofftemperaturen oder lokale Leistungsdichten erreicht werden kann. In früheren Studien, wie z. B. [TEU1992], wurden bereits mögliche Einbrennphasen für den HTR-Modul simuliert.

Die Auslegung des Gleichgewichtscores wurde von Interatom unter Anwendung von ZIRKUS [BER2003] vorgenommen und ist in [SIE1987] dokumentiert. Im Rahmen dieser Arbeit wird diese gekoppelte nukleare und fluidmechanische Rechnung mit dem FZJ eigenen Programmpaket VSOP [RUE2012] wiederholt, um die Ausgangsbasis für die Spaltproduktfreisetzungsrechnungen wiederherzustellen. Die Einbrennphase wird in Rahmen dieser Studie nicht wiederholt.

Tabelle 4.1 und Tabelle 4.2 zeigen die wichtigsten Auslegungsparameter für den HTR-Modul. Bei der Festlegung der Parameter, Stoffwerte usw. wurden frühere Studien, wie z. B. [SIE1987, TEU1992], herangezogen.

Tabelle 4.1: Auslegungsparameter des HTR-Modul-Cores

Reaktorcore		
thermische Leistung	[MW]	200
mittlere Leistungsdichte	[MW/m ³]	3
Eintritts- und Austrittstemperatur des Heliums	[°C]	250 / 700
Systemdruck	[MPa]	6
mittlere Höhe / Radius Kugelschüttung	[mm]	943,14 / 1.500
Beschickungsweise der Brennelemente		MEDUL (15-fach)
Verweilzeit der Kugeln außerhalb des Cores	[Tage]	3,6
mittlere Packungsdichte der Kugelschüttung		0,61

Tabelle 4.2: Auslegungsparameter des HTR-Modul-Brennelements (* VLT = Volllasttage)

Brennelement		Erstcore	Gleichgewichtscore
Kugeldurchmesser	[mm]		60
Dicke der brennstofffreien Matrixzone	[mm]		5
Schwermetallgehalt je Brennelement	[g]		7
Dichte Matrixgraphit	[g/cm ³]		1,75
Anreicherung des Urans (U-235 / U)	[Gew.-%]	4,2	8,0
mittlere Lebensdauer der Brennelemente	[VLT]*	-	972

TRISO-Partikel			
Durchmesser des Partikelkerns	[µm]		500
Material der Beschichtung		Puffer, PyC, SiC, PyC	
Schichtdicke der Beschichtung	[µm]	95 / 40 / 35 / 40	
Dichte der Beschichtung	[g/cm ³]	1,05 / 1,90 / 3,18 / 1,90	

In Sicherheitsstudien werden üblicherweise zwei Aktivitätswerte angegeben, nämlich der Erwartungswert und der Auslegungswert. Der Erwartungswert tendiert zur realistischen Seite, während der Auslegungswert wegen mangelnder Betriebserfahrungen mit teilweise beträchtlichen Sicherheitsaufschlägen versehen ist, um mit der Auslegung der Anlage auf jeden Fall auf der sicheren Seite zu liegen [PAS1978].

Zunächst wird die Modellierung des Kugelfließens und damit die Festlegung des aus Regionen bestehenden Gitters vorgestellt. Danach wird die Modellierung der Fluidodynamik besprochen. Anschließend werden die mit Hilfe des VSOP-Modells berechneten Eckdaten mit Interatom-Daten verglichen.

Modellierung der Kugelfließens und der Spektralzonen

Da bei der Modellierung mit STACY die Positionierung der Tracer-Brennelemente eine zentrale Rolle einnimmt, wird besonderer Wert auf das Kugelfließen gelegt. In diesem Abschnitt wird die Festlegung des Gitters, das zur Beschreibung des Kugelfließens genutzt wird, im Detail diskutiert. Der Einfluss der Beschreibung des Kugelfließens auf sowohl das Gleichgewichtscore als auch auf die Störfalltemperaturen im Druckentlastungsstörfall wird untersucht.

Bedingt durch das große Verhältnis von Höhe zu Durchmesser beim HTR-Modul von 3 zu 1, wurde in der Sicherheitsstudie von Interatom [SIE1987] die Fließgeschwindigkeit in einigen Berechnungen, z. B. in der Core-Auslegungsrechnung und in der Freisetzungsrechnung unter Störfallbedingungen, als konstant über den Radius angenommen. Jeder Fließkanal enthält bei dieser Vorgehensweise die gleiche Anzahl an Regionen (siehe Anhang 15). Alle Brennelemente, die zu demselben Zeitpunkt ins Core eingegeben worden sind, verlassen das Core gleichzeitig, nachdem das gesamte Kugelhaufenvolumen einmal umgewälzt wurde.

Das von PBMR eingesetzte Programmpaket FIPREX-GETTER wurde für räumlich aufgelöste Freisetzungssimulationen verwendet [MER2004, MER2006]. Das Paket koppelt den Freisetzungscore GETTER [ROE2001, KES2007] mit VSOP. Dieses Programmpaket wurde u. a. auf Reaktorkonzepte mit feststehender Mittelsäule, in denen die Brennelemente über mehrere dezentrale Abzüge dem Core entnommen werden, angewandt. In den veröffentlichten Modellen wurde kein paralleles Fließen, wie beim HTR-Modul angenommen, sondern es wurden die drei separaten Kugelabzugsvolumina im

zweidimensionalen Modell als ein Abzug abgebildet (siehe Anhang 16). Die verringerte Fließgeschwindigkeit am inneren und äußeren Reflektor wird in diesem Modell durch eine erhöhte Regionenanzahl berücksichtigt.

Im Gegensatz zu der von Interatom benutzten Berechnungskette, wird bei der im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Berechnungskette in allen Rechenprogrammen (VSOP und STACY) das gleiche Gitter verwendet. Zuerst wird untersucht, wie sich die Beschreibung des Kugelfließens auf die Core-Auslegung und die für die Spaltproduktfreisetzung wichtigen Größen auswirkt. Aus diesem Grund werden verschiedene VSOP-Modelle mit unterschiedlich detaillierten Beschreibungen des Kugelfließens entwickelt (siehe Abbildung 4.1). Im Gegensatz zu ZIRKUS kann der Schüttkegel aufgrund von Modelleinschränkungen in VSOP bei allen Modellen nicht im Detail modelliert werden, sondern dessen Volumen wird durch einen Zylinder mit identischem Volumen berücksichtigt.

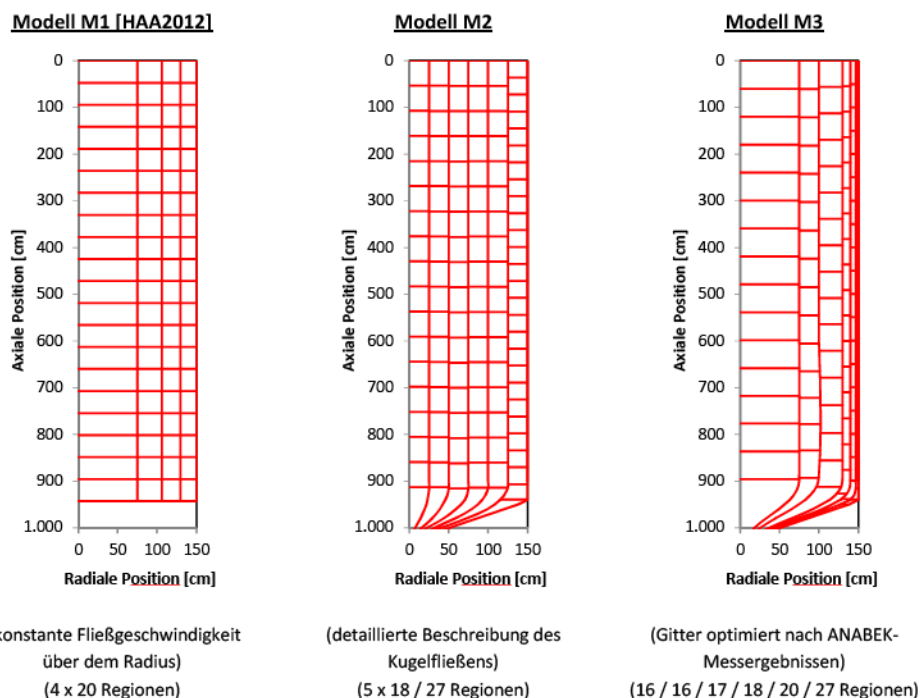


Abbildung 4.1: Materialgitter dreier VSOP-Modelle für den HTR-Modul mit unterschiedlicher Beschreibung des Kugelfließverhaltens

Das erste Modell (M1) [HAA2012] ist ein vereinfachtes Modell, bei dem Geschwindigkeitsdifferenzen der Brennelemente im Kugelhaufen vernachlässigt wurden. Das Modell orientiert sich am ZIRKUS-Modell von Siemens-Interatom. Bei Modell M1 wird der Konus im Gegensatz zu dem ZIRKUS-Modell nicht modelliert und das Kugelfließen durch vier volumengleiche Kanäle und jeweils 20 Regionen abgebildet (siehe Abbildung 4.1).

Das Volumen der Kugelschüttung im Abzugstrichter wird vernachlässigt. Bei den beiden anderen Modellen wird der Konus abgebildet und der Kugelhaufen in sechs Fließkanäle unterteilt. Lediglich die Begrenzungslinien der Fließkanäle und deren Einteilung sind unterschiedlich. Beim zweiten Modell (M2), das im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde, wurde eine häufig in der Literatur

vorgefundene Einteilung der Regionen für die Kanäle gewählt, bei der alle Kanäle, die nicht mit dem radialen Reflektor in Kontakt stehen, über die gleiche Anzahl an Regionen verfügen. Für den anderen Kanal wird die anderthalbfache Anzahl an Regionen gewählt, um die Interaktion mit der Wand darzustellen. Dies entspricht dem Verhältnis bei dem Modell des PBMR-400 (siehe Anhang 16).

Das Verweilzeitspektrum des in Abschnitt 3.3 beschriebenen ANABEK-Versuches [BAB1992] wird zur Festlegung des Regionengitters für das Modell M3 herangezogen. Über die Anzahl Kanäle und die Anzahl der Regionen für jeden Kanal wird das Modell eindeutig bestimmt. Die Modellierung des Experiments im Stromröhrenmodell ist in Abbildung 4.2a dargestellt. Zur Bestimmung der Begrenzungslinien der einzelnen Kanäle werden Fließkurven aus der Literatur herangezogen [POH2009]. Diese sind in Anhang 17 dargestellt.

Bei einer Abbildung des ANABEK-Versuchs mit dem VSOP-Kugelfließmodell entsteht bedingt durch die Einteilung des Volumens in Kanäle eine Stufenfunktion. Ein Ausschnitt einer solchen Stufenfunktion ist in Abbildung 4.2b dargestellt.

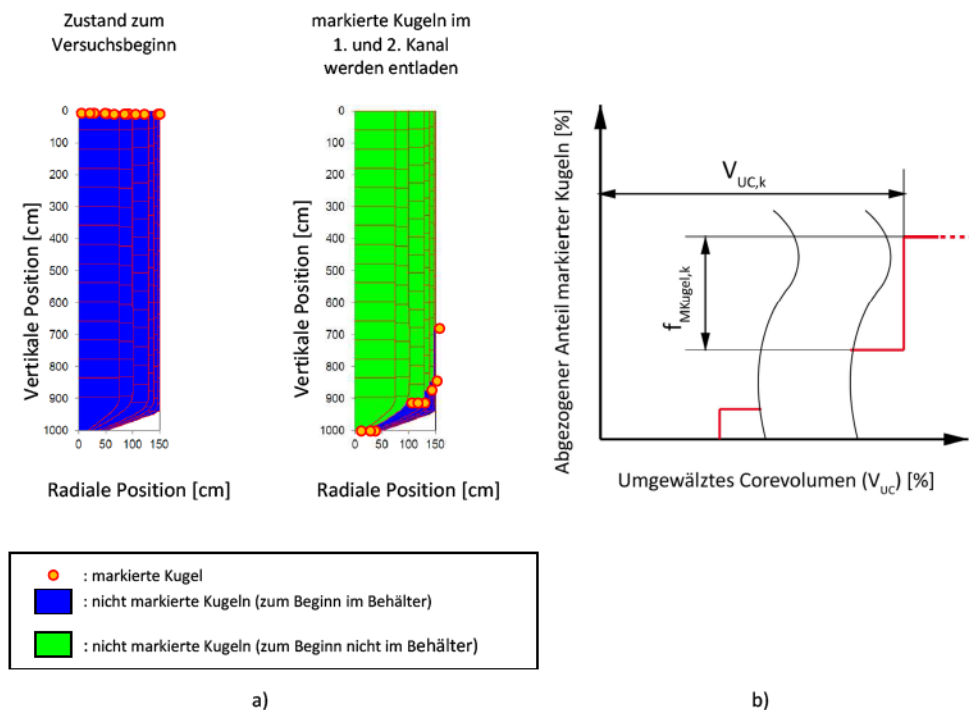


Abbildung 4.2: a) Modellierung des ANABEK-Versuches in VSOP 99/09 (Modell mit 16/16/17/18/20/27 Regionen)
b) Ausschnitt aus einem Verweilzeitdiagramm mit Stufen

Die Höhe einer Stufe „k“ im Verweilzeitspektrum, ausgedrückt durch einen prozentualen Anteil von markierten Kugeln, die bei $V_{uc,k}$ abgezogen werden, wird durch die Oberflächenverhältnisse an der Kugelschüttungsoberfläche bestimmt und berechnet sich nach folgender Gleichung:

$$f_{\text{MKugel},k} = \frac{R_{a,k}^2 - R_{i,k}^2}{R_{\text{Core}}^2} \cdot 100 \quad 4.1$$

mit: $R_{i,k}$ - Innenradius des k-ten Kanals an der Kugelschüttungsoberfläche [m]
 $R_{a,k}$ - Außenradius des k-ten Kanals an der Kugelschüttungsoberfläche [m]
 R_{Core} - Außenradius der Kugelschüttung [m]

Der Zeitpunkt, an dem die markierten Kugeln aus Kanal „k“ den Behälter verlassen, wird durch die Anzahl der Regionen des Kanals bestimmt. Der Anteil am Gesamtvolumen, der bis zu diesem Zeitpunkt umgewälzt wurde, lässt sich nach folgender Gleichung bestimmen:

$$V_{\text{UC},k} = \frac{\sum_{i=1}^{n_{\text{Ch}}} V_{\text{Reg},i} \cdot n_{\text{Reg},k}}{V_{\text{Core}}} \quad 4.2$$

mit: $V_{\text{Reg},i}$ - Volumen einer Region in Kanal „i“ [m³]
 V_{Core} - Gesamtvolumen der Kugelschüttung [m³]
 $n_{\text{Reg},k}$ - Anzahl Regionen in Kanal „k“
 n_{Ch} - Anzahl Kanäle
 i - Laufindex

Dies folgt aus der Überlegung, dass bis zur Entnahme der markierten Kugeln aus Kanal „k“, „ $n_{\text{Reg},k}$ “-Zeitschritte des Brennstoffmanagements stattgefunden haben müssen. So kommen die markierten Kugeln im ersten Kanal in dem in Abbildung 4.2 dargestellten Beispiel nach 16 Schritten des Brennstoffmanagements unten an. Während dieser 16 Schritte wird das gesamte Volumen des Anfangszustands, das in Abbildung 4.2b nicht mehr im Behälter ist, ausgewälzt. Die Verweilzeit-spektrern der Reaktormodelle M1 und M2 sind dem gemessenen Spektrum in Abbildung 4.3 gegen-übergestellt.

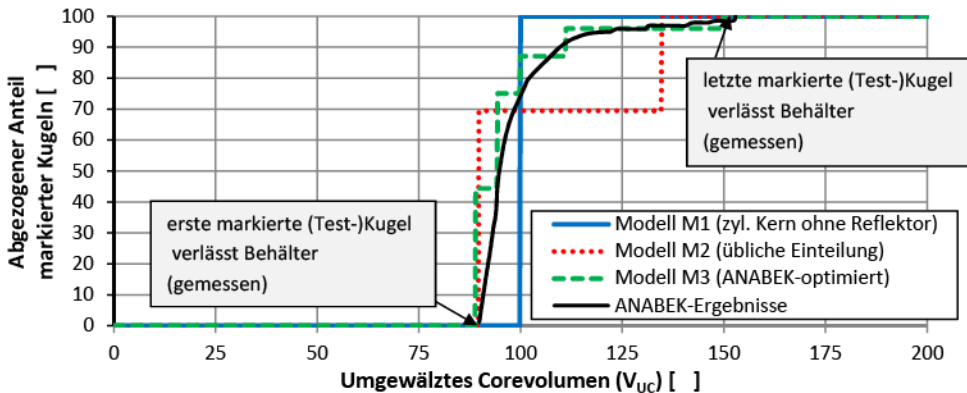


Abbildung 4.3: Gegenüberstellung des Verweilzeitspektrums des ANABEK-Versuchsstandes mit dem Kugelfließmodell in VSOP bei verschiedenen Modellkonfigurationen

Zu sehen ist, dass die markierten Kugeln beim Modell M1 mit radial konstanter Fließgeschwindigkeit den Behälter alle gleichzeitig verlassen. Die Versuchsergebnisse werden damit nicht gut getroffen. Beim zweiten Modell, bei dem die Interaktion mit der Wand berücksichtigt wird, verlassen die markierten Kugeln den Behälter in zwei Chargen. Da der Oberflächenanteil des äußersten Kanals

relativ groß ist im Vergleich zu den anderen Kanälen, ist die Menge an Testkugeln, die den Behälter zeitverzögert verlassen, recht groß. Diese Modellierung mit M2 stellt ebenfalls keine wesentlich bessere Näherung des Versuchs dar.

Das dritte Modell soll das gemessene Fließverhalten präziser abbilden. Das Fließverhalten dieses Modells kann durch eine Anpassung der Modellierung an das gemessene Verhalten angeglichen werden. Dieser Anpassung sind allerdings durch diverse Aspekte, wie beispielsweise das Gitter der fluiddynamischen Rechnung, um numerische Schwierigkeiten zu vermeiden, Grenzen gesetzt. Die stetige, monoton wachsende Kurve aus dem Versuch kann aufgrund der geringen Anzahl der Kanäle nur grob approximiert werden.

Es wurde versucht, eine möglichst gute Näherung des berechneten Verweilzeitspektrums an das gemessene Spektrum durch eine Anpassung sowohl der Regionenanzahl in jedem Kanal als auch der radialen Einteilung der Kanäle zu erreichen. Das Verweilzeitspektrum des Modells M3 ist in Abbildung 4.3 dargestellt. Die Eckdaten, die das Gitter definieren, sind in Anhang 18 aufgelistet. Durch die kanalspezifische Regionenanzahl wird das gemessene Verweilzeitspektrum präziser angenähert. Sowohl die erste markierte Kugel als auch die letzte werden bei der optimierten Modellierung in guter Näherung getroffen.

Mit der Festlegung der Regionen sind die Spektralzonen im Kugelhaufen festgelegt. Da das Gleichgewichtscore lediglich eine Brennelementsorte enthält, kann die gleiche Definition der Spektralzone im gesamten Kugelhaufen verwendet werden. Für den Bereich außerhalb des Cores wird eine separate Spektralzone definiert.

Modellierung der Fluidmechanik und Neutronik

Ein weiterer wichtiger Aspekt in der Erstellung eines VSOP-Rechenmodells ist die Modellierung der Fluidmechanik. Für jedes im Reaktor verwendete Material müssen für die fluidmechanische Rechnung wichtige Eigenschaften, wie z. B. Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität, Emissionswert und Feststoffvolumenanteil, festgelegt werden. Bei der Festlegung der Materialeigenschaften wurden die in der Sicherheitsstudie benutzten Materialdaten übernommen. Eine Übersicht dieser Daten ist in Anhang 19 dargestellt. Aufgrund der Tatsache, dass im Rahmen dieser Arbeit eine Best-Estimate-Rechnung durchgeführt wird, wird bei der Definition der Wärmeleitfähigkeit im Brennelement abgewichen. In der Interatom-Rechnung wird anstelle der in Abschnitt 2.5.2 vorgestellten gemessenen Wärmeleitfähigkeit, die eine Funktion sowohl von der Temperatur als auch von der Neutronenfluenz ist, ein konstanter Wert angenommen. Dabei wurde in konservativer Weise eine Wärmeleitfähigkeit von $0,17 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ angenommen, die einer Wärmeleitfähigkeit am Ende der Lebensdauer einer Kugel bei der höchsten Brennstofftemperatur entspricht.

Die Wärmeleitfähigkeiten wurden in Experimenten ermittelt, bei denen Graphitproben zunächst bis zu einer vorgegebenen schnellen Neutronenfluenz bestrahlt wurden. Anschließend wurde die Wärmeleitfähigkeit außerhalb der Bestrahlungseinrichtung für 10 Temperaturen ($100 \dots 1.000^\circ\text{C}$) bestimmt [RUE2012]. Für Temperaturen oberhalb von 1.000°C wurden die Stoffdaten durch Extrapolation erstellt [RUE2012]. Während der Messung der Wärmeleitfähigkeit wurden die Graphitproben nicht bestrahlt. Bei den Messungen wurde darauf geachtet, dass die Temperatur während der Messung die Bestrahlungstemperatur nicht überstieg. Somit bleiben die Strahlenschäden in Form von z. B. Gitterfehlern, die zu der Verringerung der Wärmeleitfähigkeit führen, eingefroren und

werden nicht ausgeheilt [HAA2013]. Die gemessenen Daten entsprechen somit dem heutigen Kenntnisstand und werden im Rahmen dieser Arbeit anstelle der konstanten Wärmeleitfähigkeit verwendet. Trotzdem müssten die heutigen Referenzgraphitsorten hinsichtlich der Wärmeleitfähigkeit neu qualifiziert werden, falls die in Abbildung 2.14 gezeigten Verläufe für die Simulation herangezogen werden sollten.

Diese Materialien werden dem Gitter, das für die fluidmechanische Rechnung verwendet wird zugewiesen. Dabei soll beachtet werden, dass die Zuweisung der Materialien im Einklang mit der Festlegung der Regionen erfolgt. Somit existiert für jedes der drei Modelle M1, M2 und M3 ein entsprechendes Rechengitter mit einer individuellen Zuweisung der Materialien. In Anhang 20 ist die Materialzuweisung am Beispiel des Models M3 gezeigt. Bei dem dargestellten Modell ist die Geometrie des Bodenreflektors durch einen treppenförmigen Verlauf angenähert. Die Materialbelegung ist bei den anderen beiden Modellen (M1 und M2) bis auf Kugelhaufen und Bodenreflektor identisch.

Zur Beschreibung der räumlichen Verteilung der Nuklidinventare des frischen Cores wird für jede Region ein individueller Nuklidvektor definiert. Dabei wird für das gesamten Kugelhaufenvolumen der Nuklidvektor eines frischen Brennelements definiert. Wie vorher erwähnt, kann eine Region außerhalb des aktiven Cores verschiedene Grobmaschen fassen. In der Abbrandrechnung wird der Nuklidvektor mit dem volumengewichteten Neutronenfluss abgebrannt. Aus diesem Grund werden die Regionen so festgelegt, dass sowohl unterschiedliche Materialien mit einem unterschiedlichen Nuklidvektor als auch Abbranddifferenzen aufgrund der Neutronenflussverteilung korrekt erfasst werden. Für jede dieser Regionen wurde ein individueller Nuklidvektor definiert. Hierfür wurden Angaben aus dem Sicherheitsbericht herangezogen.

Vergleich der relevanten Eckdaten

Nach der Entwicklung der drei Kugelfließmodelle in VSOP, wurde das Gleichgewichtscore für jedes Modell bestimmt. In diesem Abschnitt erfolgt der Vergleich einiger für die Spaltproduktfreisetzungsberechnung relevanter Eckdaten der erstellten Modelle mit von Interatom berechneten Daten.

Abbildung 4.4 zeigt die am Beispiel des HTR-Modul mit VSOP berechneten Brennelementzentraltemperaturen in Abhängigkeit von der Höhe für Modell M1, M2 und M3 mit unterschiedlicher Abbildung des Kugelfließverhaltens.

Durch die Vernachlässigung der Brennelemente im Bereich der Schräge des Bodenreflektors ist die mittlere Leistungsdichte im Reaktor bei Modell M1 geringfügig höher, was zu etwas höheren Brennstofftemperaturen führt. Die Differenzen zwischen den unterschiedlichen Temperaturverläufen sind klein, obwohl die relativen Fließgeschwindigkeiten über dem Radius bei den drei Modellen sehr unterschiedlich gewählt wurden.

Abbildung 4.5 zeigt den Vergleich des Gleichgewichtsinventars einiger ausgewählter Nuklide mit dem Interatom-Sicherheitsbericht [SIE1987]. Zu sehen ist, dass die im Rahmen dieser Arbeit berechneten Inventare mit den Interatom-Daten sehr gut übereinstimmen.

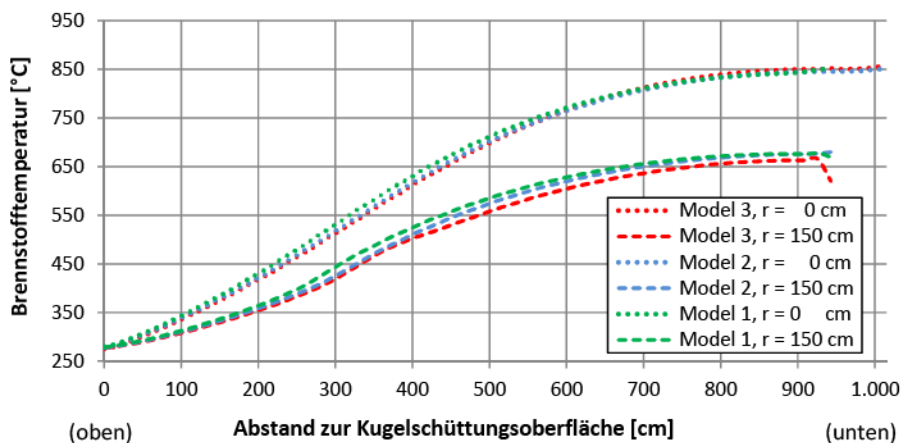


Abbildung 4.4: Zentraltemperatur im Brennelement in Abhängigkeit von der Corehöhe an zwei radialen Positionen für die verschiedenen Kugelfließmodelle (Modell M1, M2 und M3)

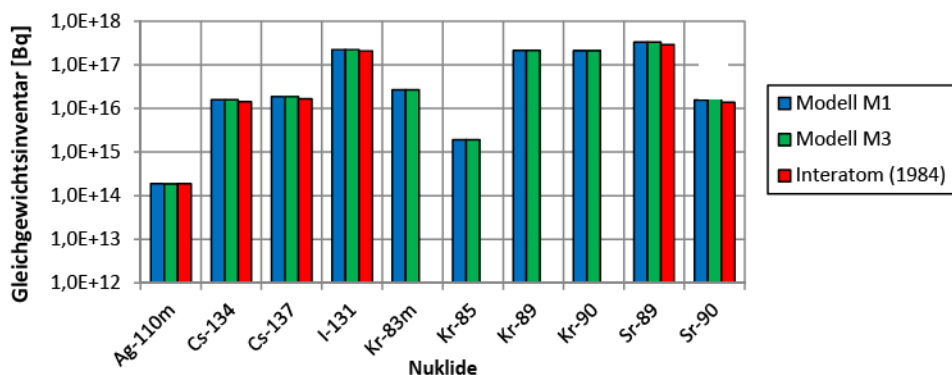


Abbildung 4.5: Vergleich der mit ORIGEN-Juel berechneten Gleichgewichtsinventare einiger ausgewählter Nuklide (Modell M1 und M3) mit entsprechenden Interatom-Daten

Abbildung 4.6 zeigt den Vergleich der mit VSOP ermittelten Zentraltemperaturen für das Modell M1 im Vergleich zum Sicherheitsbericht. Dabei wird im Sicherheitsbericht nicht zwischen Kugeln mit unterschiedlicher Durchlaufzahl differenziert. Zu sehen ist, dass die im Rahmen dieser Arbeit ermittelten Temperaturen diejenigen aus der früheren Studie insbesondere in der oberen Corehälfte unterschreiten. In diesem Bereich sind die Temperaturen allerdings noch so niedrig, dass die Spaltproduktfreisetzung in diesem Bereich im Vergleich zu tieferen Bereichen vergleichsweise gering ist. Im unteren Bereich sind die Temperaturen ähnlich.

Wie vorher beschrieben, wurde in der Interatom-Rechnung eine konstante Wärmeleitfähigkeit von $0,17 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ angenommen. Der Einfluss dieser Annahme auf den Verlauf der Brennelementtemperaturen wird an dieser Stelle mit Hilfe einer VSOP-Rechnung näher untersucht. Abbildung 4.7 zeigt, dass die Berücksichtigung einer konstanten Wärmeleitfähigkeit, die deutlich unterhalb der gemessenen Wärmeleitfähigkeit von unbestrahltem Matrixgraphit liegt, zu deutlich höheren Brennelementtemperaturen führt.

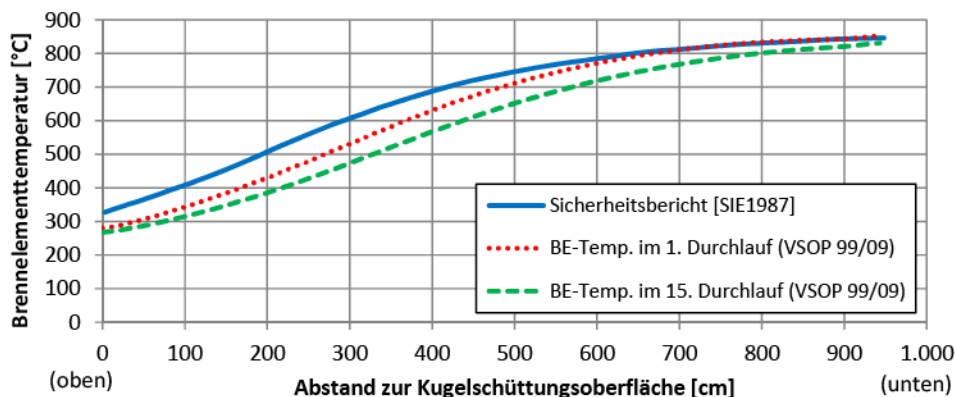


Abbildung 4.6: Vergleich der Brennelementtemperaturen in Abhängigkeit von der Corehöhe entlang der Symmetrieachse im HTR-Modul (Modell M1)

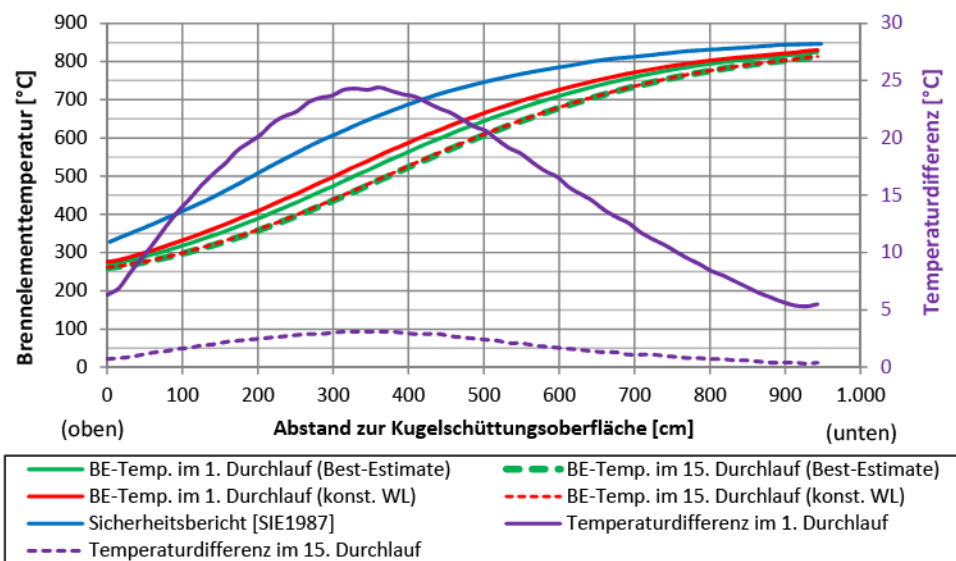


Abbildung 4.7: Verlauf der Brennelementtemperaturen in Abhängigkeit von der Corehöhe entlang der Symmetrieachse im HTR-Modul unter Berücksichtigung einer konstanten Wärmeleitfähigkeit (WL) von $0,17 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ und einer von sowohl Neutronenfluenz als auch Brennstofftemperatur abhängigen Wärmeleitfähigkeit (Best-Estimate)

Vor allem im Bereich der maximalen Leistung ist die Temperaturdifferenz mit 25°C sehr ausgeprägt. Im 15. Durchlauf ist die Wärmeleitfähigkeit bei beiden Ansätzen sehr ähnlich, da die Wärmeleitfähigkeit nach [BIN1974] aufgrund der recht hohen Neutronenfluenz stark vermindert und somit vergleichbar mit dem Minimalwert von $0,17 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ ist. Die Temperaturdifferenzen sind im 15. Durchlauf somit weniger stark ausgeprägt. Im Vergleich zu dem im Sicherheitsbericht dargestellten Temperaturverlauf sind die mit VSOP ermittelten Temperaturdifferenzen bei Verwendung einer konstanten Wärmeleitfähigkeit kleiner. Somit werden die Temperaturdifferenzen zwischen der

VSOP- und Interatom-Rechnung nicht komplett durch die Verwendung einer unterschiedlichen Wärmeleitfähigkeit hervorgerufen.

Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Rechnungen haben gezeigt, dass der Einfluss der Kugelfließmodellierung auf andere Größen, wie z. B. die Neutronenflussverteilung und das Nuklidinventar, einen vernachlässigbaren Einfluss hat. Demnach kann insgesamt gefolgert werden, dass die Modellierung des Kugelfließens nur einen geringen Einfluss auf das Gleichgewichtscore des HTR-Modul hat. Die Annahmen von Interatom konnten somit bestätigt werden. Des Weiteren konnte ein sehr gut vergleichbarer Corezustand mit Hilfe von VSOP wiederhergestellt werden.

4.1.2 Berechnung der Brennelementtemperaturen in der Kernaufheizphase nach DLOFC

Mit dem Gleichgewichtscore als Ausgangszustand können nun Störfallrechnungen durchgeführt werden. Hierzu wird das am FZJ entwickelte Programm MGT-3D verwendet. Aufbauend auf ein VSOP-Modell kann mit diesem Programm eine transiente Störfallrechnung durchgeführt werden. Im Rahmen dieser Arbeit werden die maximalen Störfallfolgen einer Druckentlastung des Reaktors im Falle des vollständigen, nicht absperrenden Abrisses einer Anschlussleitung mit größtmöglichem Ausströmquerschnitt (DN-65) untersucht [SIE1988a]. Dieser Störfall wird auch Druckentlastungsstörfall, „depressurized loss of forced cooling“ (DLOFC), genannt. Nach Abriss der Leitung wird der Primärkreislauf innerhalb weniger Minuten auf Umgebungsdruck entlastet [SIE1988a]. Bei diesem Störfall stellen sich im Vergleich zu anderen Störfällen hohe Brennelementtemperaturen dar, was zu einem deutlichen Anstieg der Freisetzungsraten gegenüber den Freisetzungsraten im Normalbetrieb führt. Bei diesen Leckagen werden zusätzlich zur Freisetzung von Kühlgasaktivität und staubgebundener Aktivität in der Druckentlastungsphase weitere Nuklide aus den Brennelementen aufgrund der nachfolgenden Kernaufheizung freigesetzt.

Die Spaltproduktfreisetzung ist stark von den Brennelementtemperaturen abhängig. Daher werden die Temperaturen unter Störfallbedingungen detaillierter untersucht. Die im Rahmen dieser Arbeit ermittelten Brennelementtemperaturen werden mit Ergebnissen früherer Studien von Interatom und dem Forschungszentrum Jülich [JAH1991] verglichen.

Die sich bei passiver Nachwärmeabfuhr in den Reaktorkomponenten einstellenden Temperaturen hängen in erster Linie vom Druck im Primärkreislauf ab, da die passiven Wärmetransportvorgänge unterschiedlich greifen [JAH1991]. Als Auslegungsstörfall gilt dabei ein Corekühlungsstörfall bei druckentlastetem Reaktor mit ausgefallenem Hauptkühlsystem und passiver Wärmeableitung an das Flächenkühlsystem [JAH1991]. In der fluiddynamischen Simulation wird angenommen, dass die geometrische Integrität des Kernreaktors während des Störfalls nicht beeinträchtigt wird. Die Funktionsfähigkeit des Flächenkühlers, der die äußere Struktur vor zu hohen Temperaturen schützen soll, hat dabei keinen Einfluss auf das Maximum der Coretemperatur [JAH1991]. Im untersuchten Störfallsszenario wird in konservativer Näherung auch von einem Ausfall des Flächenkühlsystems ausgegangen.

Die eigentliche Druckentlastungsphase wird in der Rechnung nicht im Detail simuliert. Vereinfachend wird angenommen, dass der Systemdruck direkt zu Störfallbeginn auf das Niveau des Umgebungsdrucks abfällt und kein Kühlmittel mehr im Core vorhanden ist. Die für die Kernaufheizung verantwortliche Nachzerfallsleistung wird nach [DIN1990] berechnet.

Für die vorher beschriebenen Rechenmodelle M1, M2, M3 werden die Brennelementtemperaturen in der Kernaufheizphase nach der Druckentlastung mit MGT-3D berechnet. Die maximale Brennelementtemperatur während der ersten 100 Stunden der Kernaufheizphase ist in Abbildung 4.8 dargestellt. Aus den Kurven geht nicht hervor, an welchem Ort diese maximale Brennelementtemperatur auftritt.

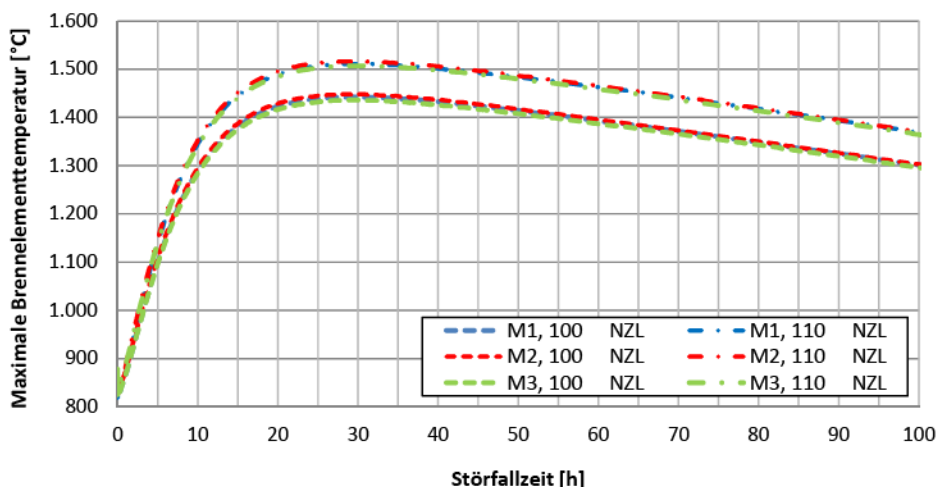


Abbildung 4.8: Vergleich der mit MGT-3D berechneten maximalen Brennelementtemperatur in der Kernaufheizphase (Reaktormodelle mit unterschiedlicher Modellierung des Kugelfließens, NZL = Nachzerfallsleistung)

Dabei wird in den ersten Rechnungen davon ausgegangen, dass die Nachzerfallsleistungsberechnung nach DIN exakte Werte liefert (100 Nachzerfallsleistung). Bei der zweiten Variante wird mit einem Sicherheitszuschlag von 10 bei der Nachzerfallsleistung gerechnet. Bedingt durch diese um 10 erhöhte Nachzerfallsleistung steigt die maximale Brennelementtemperatur um etwa 70°C an. Die Abbildung 4.8 zeigt, dass die Brennelementtemperaturen durch die unterschiedliche Modellierung des Kugelfließens und damit durch die geringfügig unterschiedlichen Gleichgewichtscores nicht beeinflusst werden. Gleiches gilt für die räumliche Temperaturverteilung (hier nicht dargestellt). Aus diesem Grund werden an dieser Stelle, stellvertretend für alle anderen Modelle, die Daten von Modell M3 präsentiert.

Die mit MGT-3D berechneten Brennelementtemperaturen in der Kernaufheizphase sind in Abbildung 4.9 für das Modell M3 dargestellt. In der Rechnung wurde die nominelle Nachzerfallsleistung angesetzt. Die Abbildung zeigt, dass die Position der maximalen Brennelementtemperatur im Störfall im Vergleich zu bestimmungsgemäßem Betrieb langsam nach oben wandert. Aufgrund der nicht mehr vorhandenen Konvektion wird die Wärme nur noch über Wärmeleitung und Strahlung abgeführt. Da die Wärmeleitwege auf der Zentralachse am längsten sind, sind die Brennelementtemperaturen in diesem Bereich am höchsten. Des Weiteren ist die Nachzerfallsleistung auf halber Corehöhe am größten. Nach ungefähr 30 Stunden wird das Maximum der Brennelementtemperatur erreicht, anschließend fällt die Maximaltemperatur fast linear mit der Zeit wieder ab.

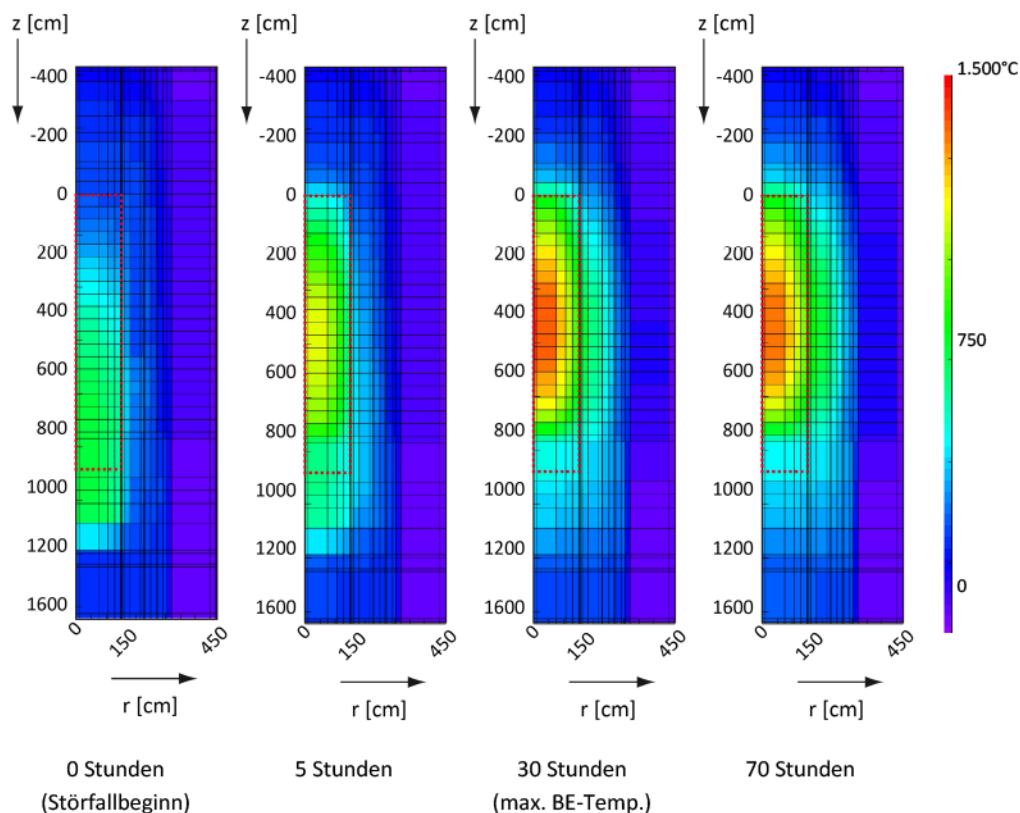


Abbildung 4.9: Räumliche Verteilung der Brennelementtemperatur in der Kernaufheizphase beim HTR-Modul (die rot umrandeten Rechtecke grenzen das aktive Core ein)

Abbildung 4.10 zeigt den zeitlichen Verlauf der Brennelementtemperatur an drei verschiedenen vertikalen Positionen entlang der Symmetrieachse. Diese Darstellung erlaubt einen genaueren Einblick in den zeitlichen Verlauf der Brennelementtemperatur in den verschiedenen Bereichen des Cores. Zu sehen ist, dass die Temperatur in verschiedenen Bereichen des Cores einen sehr unterschiedlichen zeitlichen Verlauf aufweist.

Da das Core im Normalbetrieb durch das Kühlmittel von oben nach unten zwangsdurchströmt wird, sind die Brennelementtemperaturen im Normalbetrieb im unteren Bereich des Cores am größten. Aufgrund der schnellen Druckentlastung und der damit verbundene Wegfall der Zwangsdurchströmung verlagert sich die maximale Brennelementtemperatur nach oben. Damit nimmt die Brennelementtemperatur nach wenigen Stunden im unteren Bereich des Cores ab und auf mittlerer Höhe im Vergleich zum Normalbetrieb stark zu. Im oberen Bereich des Cores nimmt die Brennelementtemperatur im Vergleich zum Verlauf auf mittlerer Corehöhe weniger stark zu, dafür wird die örtliche Maximaltemperatur an diesem Ort erst sehr viel später erreicht. Nach ca. 30 Stunden wird die maximale Brennelementtemperatur erreicht. Sie liegt ungefähr auf mittlerer Corehöhe. Die Temperatur im oberen Bereich des Cores nimmt während dieser Phase weiterhin zu, allerdings auf sehr niedrigem Niveau. Einen Vergleich zwischen der mit MGT-3D berechneten Temperaturverläufe und den von Interatom bestimmten Verläufen sind in Anhang 26 dargestellt.

Trotz vorhandener Temperaturunterschiede weisen beide Datensätze sehr vergleichbare Temperaturverläufe auf.

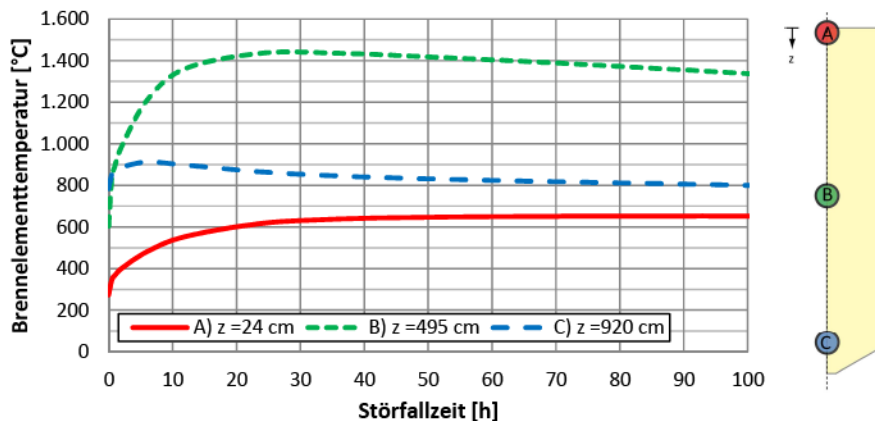


Abbildung 4.10: Zeitlicher Verlauf der Brennelementtemperatur im Druckentlastungsstörfall des HTR-Modul an drei verschiedenen vertikalen Positionen entlang der Symmetrieachse

Bei den zuvor gezeigten Brennelementtemperaturen liegen Erwartungswerte für die Eingangsdaten der Rechnung zugrunde. Die zusätzliche Berücksichtigung von Streuungen und Unsicherheiten („Designwerte“) bei den Eingabegrößen erlaubt es, auch die maximal möglichen Brennelementtemperaturen im Core zu bestimmen.

Bei einer konservativen Rechnung wird üblicherweise die Abhängigkeit von der schnellen Neutronenfluenz nicht berücksichtigt und es werden niedrige Werte für die Wärmeleitfähigkeit angenommen, wodurch höhere Brennelementtemperaturen erreicht werden. Die in [JAH1991] angenommenen Unsicherheiten bezüglich der maximalen Brennelementtemperatur sind in Tabelle 4.3 aufgelistet. Diese Zu- oder Abschläge basieren auf groben Abschätzungen. In Anhang 21 ist die Vorgehensweise zur Abschätzung der Unsicherheitsbandbreite bei der effektiven Wärmeleitfähigkeit dargestellt.

Tabelle 4.3: Unsicherheitsbandbreite bezüglich der maximalen Brennelementtemperatur beim HTR-Modul, Kernaufheizphase nach der Druckentlastung

	MGT-3D		[JAH1991]		Temperatur- differenz zwischen MGT-3D und [JAH1991] [°C]
	Max. BE-Temp. [°C]	Diff. mit BER [°C]	Max. BE-Temp. [°C]	Diff. mit BER [°C]	
Best-Estimate-Rechnung (BER)	1.442	0	1.440	0	2
BER, +10 der Nachzerfallsleistung	1.510	68	1.510	70	0
BER, -10 der effektiven Wärmeleitfähigkeit	1.486	44	1.485	45	1
BER, -10 der Wärmekapazität	1.465	23	1.455	15	10
Addition der Einzeldifferenzen	-	135	-	130	-
gleichzeitige Berücksichtigung der drei konservativen Annahmen	1.601	159	-	n. v.	-

Die in [JAH1991] abgeschätzten Änderungen der Parameter gegenüber einer Best-Estimate-Rechnung, die zu einer Erhöhung der Brennelementtemperaturen führen, werden auf das Modell M3 übertragen. Dies erlaubt einen direkten Vergleich der Ergebnisse beider Rechnungen. Die zeitlichen Verläufe der maximalen Brennelementtemperatur sind für die unterschiedlichen Fälle in Abbildung 4.11 dargestellt. Dabei ist der Verlauf der Best-Estimate-Kurve identisch mit der Kurve des Modells M3 bei 100 % Nachzerfallsleistung in Abbildung 4.8.

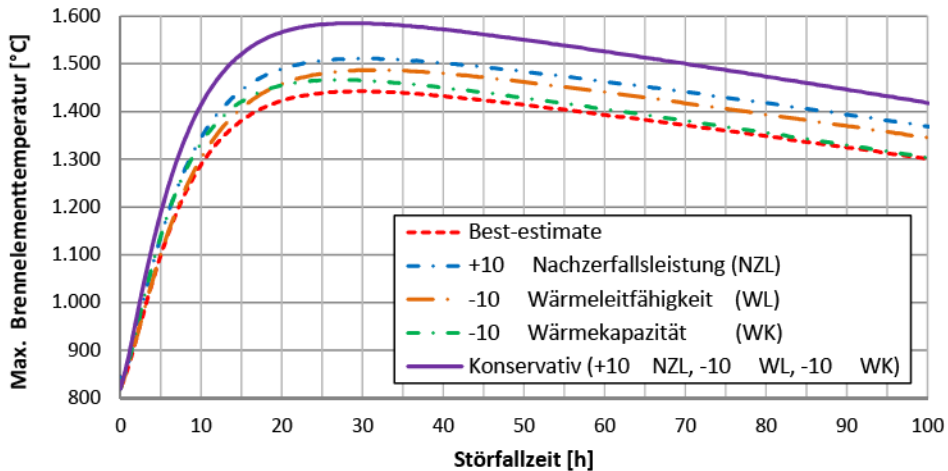


Abbildung 4.11: Zeitlicher Verlauf der mit MGT-3D berechneten maximalen Brennelementtemperatur in der Kernaufheizphase im HTR-Modul für verschiedene Rechenfälle (Modell M3)

Vor allem die Erhöhung der Nachzerfallsleistung um 10 % führt zu einem deutlichen Anstieg der Brennstofftemperaturen in der Kernaufheizphase. Die gleichzeitige Berücksichtigung der drei konservativen Annahmen führt zu einem größeren Temperaturanstieg als die Addition aller Temperaturanstiege bei getrennter Betrachtung. Das heißt, dass die Annahmen sich gegenseitig verstärken. Die im Rahmen dieser Arbeit mit MGT-3D ermittelte Maximaltemperatur stimmt für alle Rechenfälle sehr gut mit der in [JAH1991] aufgeführten Maximaltemperaturen überein.

In Veröffentlichungen von Interatom werden keine detaillierten Brennelementtemperaturfelder während der Kernaufheizphase dargestellt. Dafür wurden die Störfalltemperaturfelder in Brennelementtemperaturklassen unterteilt. In Abbildung 4.12 sind Brennelementtemperaturklassen in Abhängigkeit von der Störfallzeit aufgetragen, wobei lediglich diejenigen oberhalb von 1.000, 1.200 und 1.400 °C gezeigt werden. Abbildung 4.12 lässt allerdings keine räumliche Aufschlüsselung der Temperaturverteilung zu. Nur ein kleiner Anteil des Brennstoffs wird über eine relativ kurze Zeitspanne mit einer Temperatur oberhalb von 1.400 °C beaufschlagt. Die drei verschiedenen Rechnungen (100 % Nachzerfallsleistung, 110 % Nachzerfallsleistung, konservative Rechnung), die im Rahmen dieser Arbeit berechnet wurden, werden mit den in [SIE1988a] publizierten Verläufen verglichen. Die Rechnung mit 110 % Nachzerfallsleistung trifft unter Berücksichtigung weiterer Best-Estimate-Annahmen die von Interatom berechnete Verteilung am besten. Vor allem die beiden höheren Temperaturverläufe sind mit denen von Interatom deckungsgleich. Die hier durchgeführte konservative Rechnung liefert eine Temperaturverteilung, die immer oberhalb der Interatom-

Verläufe liegt. Die in die Freisetzungsrechnung eingehenden Brennelementtemperaturen sind demnach vergleichbar mit den von Interatom ermittelten Werten.

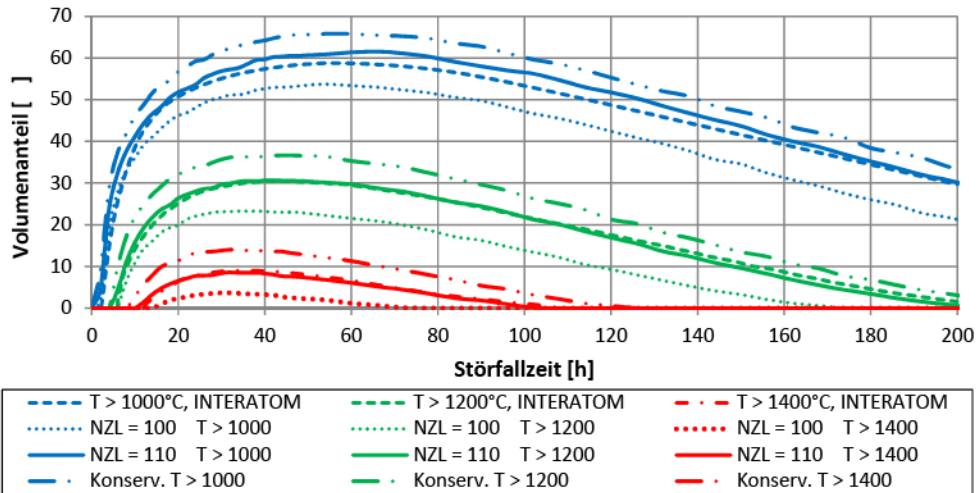


Abbildung 4.12: Mit MGT-3D berechneten Brennelementtemperaturklassen im HTR-Modul im Druckentlastungsstörfall, Vergleich eigener Rechnungen mit [SIE1988a]

4.2 Spaltproduktfreisetzungsrechnungen

Nachdem sowohl das Gleichgewichtscore und die Kernaufheizphase erneut berechnet und verglichen wurden, liegen alle notwendigen Eingangsdaten von Seiten der Fluidmechanik und Neutronik für eine Spaltproduktfreisetzungsrechnung vor. Um später einen Vergleich mit Freisetzungswerten aus dem Interatom-Sicherheitsbericht zu ermöglichen, werden zuerst die Vorgehensweise in dieser Studie erläutert sowie Unterschiede in der Modellierung herausgestellt und diskutiert. Zwei wichtige Eingangsgrößen in der Freisetzungsrechnung sind die Diffusionskoeffizienten der betrachteten Spaltprodukte in den Brennstoffmaterialien sowie die Partikelbruchanteile als Funktion der Zeit.

4.2.1 Verwendeten Daten

Diffusionskoeffizienten

Der Transport von Spaltprodukten in den Festkörpern wird durch das Fick'sche Diffusionsmodell beschrieben. Dabei werden effektive Diffusionskoeffizienten in die Berechnung eingesetzt. Die Diffusionskoeffizienten sind abhängig vom Brennstoffdesign und vom -herstellungsprozess und sind nicht allgemeingültig für HTR-Brennstoff. Somit können die Diffusionskoeffizienten bei einer Änderung des Designs oder des Herstellungsprozesses nicht ohne Weiteres übertragen werden und müssen immer neu bestimmt werden. In der Vergangenheit wurden die Diffusionskoeffizienten u. a. anhand von zusätzlichen Experimenten und Nachrechnungen von Heiztests immer wieder überprüft und ggf. revidiert. Die derzeit gültigen Empfehlungen verschiedener Institutionen wurden als Ergebnis eines von der IAEA koordinierten Forschungsprojektes (CRP-2) zum HTR-Brennstoff publiziert [IAE1997]. Da die Diffusionskoeffizienten einen großen Einfluss auf die Freisetzungsrechnung haben und zum Teil seit der Erfassung des HTR-Modul-Sicherheitsberichts revidiert wurden, werden sie hier näher betrachtet.

Eine Übersicht des Siemens-Interatom-Datensatzes mit Diffusionskoeffizienten ist in Tabelle 4.4 dargestellt. Für Cs-137 und Sr-90 übernahm Siemens-Interatom die damaligen Empfehlungen aus dem HBK-Standarddatensatz. Hiervon ausgenommen war nur die Aktivierungsenergie des Diffusionskoeffizienten von Strontium im A3-Matrixgraphit. Hier wird im HBK-Standarddatensatz⁵ ein Wert von 301 kJ/mol angenommen, in der Interatom-Rechnung wurde dagegen eine Aktivierungsenergie von 197 kJ/mol angesetzt.

Tabelle 4.4: Siemens-Interatom-Datensatz mit Diffusionskoeffizienten für TRISO-Partikel
*: quasi keine Durchlässigkeit, **: quasi Durchlässigkeit [SIE1987]

: Identisch zu HBK-Standarddatensatz⁵

: Unterschied zum HBK-Standarddatensatz⁵

Material	Caesium		Strontium		Silber		Iod	
	Frequenz-faktor	Akt.-energie	Frequenz-faktor	Akt.-energie	Frequenz-faktor	Akt.-energie	Frequenz-faktor	Akt.-energie
	[m ² /s]	[kJ/mol]	[m ² /s]	[kJ/mol]	[m ² /s]	[kJ/mol]	[m ² /s]	[kJ/mol]
UO ₂ -Kern	5,20·10 ⁻⁴	362	1,10·10 ⁻⁴	488	6,70·10 ⁻¹⁰	165	3,94·10 ⁻⁶	314
Puffer	1,00·10 ⁻¹² **	0	1,00·10 ⁻¹² **	0	1,00·10 ⁻¹² **	0	1,00·10 ⁻¹² **	0
LTi PyC	6,30·10 ⁻⁸	222	2,30·10 ⁻⁶	197	5,30·10 ⁻⁹	154	1,00·10 ⁻²⁴ *	0
SiC	6,68·10 ⁻¹⁴	106	1,20·10 ⁻⁹	205	3,60·10 ⁻⁹	215	1,00·10 ⁻²⁴ *	0
	2,73·10 ⁻²	482						
A3-Matrix	2,00·10 ⁻⁴	181	9,10·10 ⁻³	197	1,60·10 ⁰	258	5,00·10 ⁻⁶	0

Quasi durchlässig bedeutet, dass das Material für das Spaltprodukt fast keine Rückhaltefähigkeit aufweist. So wird für die Pufferschicht eine hohe Durchlässigkeit vorausgesetzt. Quasi undurchlässig bedeutet, dass für Materialien, die eine sehr hohe Rückhaltefähigkeit Nuklid aufweisen, im Modell ein sehr geringer Diffusionskoeffizient angesetzt wird.

In diesem Abschnitt werden die Änderungen des aktuellen deutschen Datensatzes gegenüber dem Interatom-Standarddatensatz, der in Tabelle 4.4 angegeben ist, beschrieben. Die Diffusionskoeffizienten die nicht einzeln diskutiert werden, wurden nicht revidiert gegenüber dem im Sicherheitsbericht verwendeten Diffusionskoeffizient.

Caesium

Abbildung 4.13 zeigt die Diffusionskoeffizienten von Caesium in UO₂ und SiC im Vergleich zwischen Interatom und IAEA. Vor allem bei geringeren Temperaturen ist der Diffusionskoeffizient für UO₂ laut IAEA-TECDOC-978 deutlich höher. Bei Siliziumkarbid wird im IAEA-Datensatz eine Abhängigkeit von der schnellen Neutronenfluenz angenommen, wobei die von Interatom genutzte Kurve diese Abhängigkeit nicht besitzt. Die Datenbasis für die Abhängigkeit des in Abbildung 4.13b dargestellten Diffusionskoeffizienten von der Neutronenfluenz ist nicht sehr umfangreich. Der Einfluss der Neutronenfluenz auf diesen Diffusionskoeffizienten ist allerdings nicht sehr groß, so dass eine Berücksichtigung dieser Abhängigkeit zu keinen großen Differenzen in der Freisetzungsrechnung führt. Die Diffusionskoeffizienten beider Datensätze stimmen bei der PyC-Schicht überein.

⁵ HBK: HTR Brennstoff-Kreislauf, vormals Projekt NUKEM-KFA, Koordinierung und Projektleitung in KFA

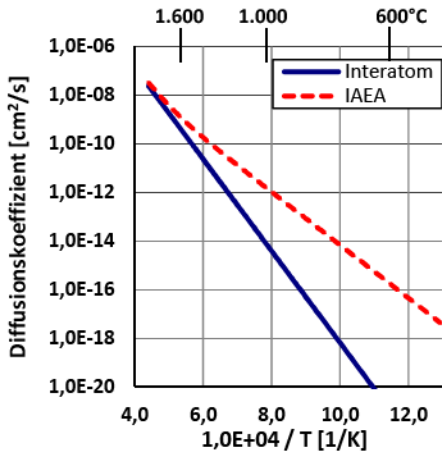
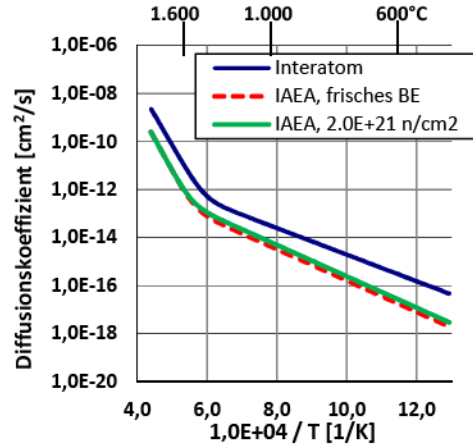
a) Diffusionskoeffizient von Cesium in UO_2 b) Diffusionskoeffizient von Cesium in SiC
(IAEA: bei einem frischen und abgebrannten BE)

Abbildung 4.13: Vergleich der Diffusionskoeffizienten von Cesium in Urandioxid und Siliziumkarbid

Strontium

Die Empfehlung der IAEA für Strontium in Urandioxid und Siliziumkarbid weicht von den Interatom-Daten ab. Bei Urandioxid ist die Aktivierungsenergie gleich, der Frequenzfaktor allerdings um Faktor 20 größer als in der Interatom-Empfehlung. Dies führt zu einer Parallelverschiebung des Diffusionskoeffizienten (siehe Abbildung 4.14a).

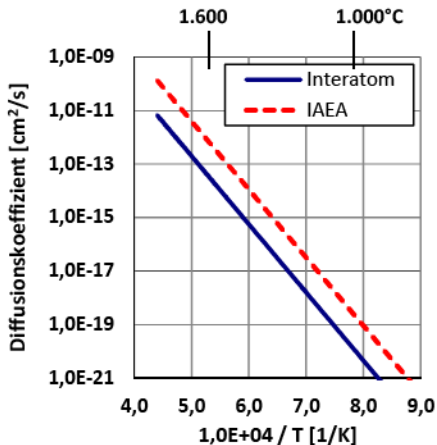
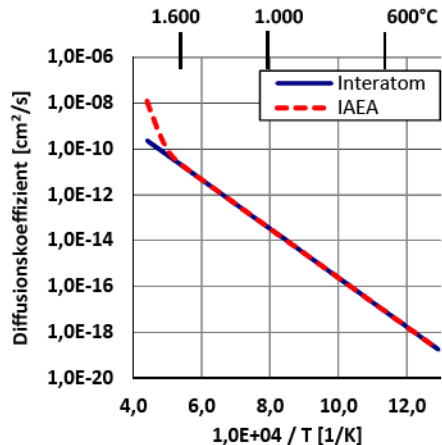
a) Diffusionskoeffizient Strontium in UO_2 b) Diffusionskoeffizient Strontium in SiC

Abbildung 4.14: Vergleich der Diffusionskoeffizienten von Strontium in Urandioxid und Siliziumkarbid

Der Niedrigtemperaturbereich ist in beiden Datensätzen für SiC identisch. Darüber hinaus gibt es im IAEA Datensatz einen zweiten Temperaturbereich mit einer hohen Aktivierungsenergie. Wie Abbildung 4.14b zeigt, führt der zusätzliche Temperaturast erst bei einem Wert von 5,25 ($\cong 1.630^\circ\text{C}$) zu einer bemerkbaren Erhöhung des Diffusionskoeffizienten. Da diese Temperaturen beim HTR-Modul nicht erreicht werden, ist der Diffusionskoeffizient nach beiden Ansätzen vergleichbar.

Silber

Aufgrund von zusätzlichen experimentellen Erkenntnissen wurde der Diffusionskoeffizient für Silber in UO_2 revidiert. Der Frequenzfaktor wurde im Vergleich zum Frequenzfaktor im HBK-Datensatz um eine Größenordnung vergrößert zu $6,7 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, die Aktivierungsenergie blieb unverändert.

Partikelbruchanteil in der Siemens-Interatom Rechnung

Eine weitere wichtige Eingabegröße für die Spaltproduktfreisetzungsrechnung ist der Partikeldefektanteil. Die Partikeldefektanteile, die von Interatom in der Freisetzungsrechnung angesetzt wurden, wurden aus Messwerten abgeleitet. Während Brennelemente der Charge AVR 19 noch einen Defektanteil von $5,0 \cdot 10^{-5}$ aufwiesen, wurden bei den Chargen AVR 21 und 21-2 nur noch Werte unterhalb der Nachweisgrenze ermittelt, weil eine Aussortierung unrunder Partikeln eingeführt wurde. Auf Basis des Ist-Standes (Erwartungswerte) damaliger Brennelementfertigung wurde in der Qualitätskontrolle ein Anteil freien Urans von typischerweise $3,0 \cdot 10^{-5}$ des Uran-Gesamtinventars des Brennelements festgelegt. Aus allen damals vorliegenden Untersuchungen ging hervor, dass der gemessene Anteil freien Urans praktisch ausschließlich aus bei der Herstellung defekt gewordener Partikeln besteht. Für radiologische Auslegungsrechnungen wird allerdings ein Wert von $6,0 \cdot 10^{-5}$ empfohlen. Brennelementlose, die diesen Wert überschreiten, würden ohnehin zurückgewiesen werden. Dieser Wert wurde auch als Teil der Zielspezifikationen für die Brennelemente des HTR-Modul vereinbart. Der störfallbedingte Partikelbruchanteil wurde aus den Heiztestergebnissen von 4 LEU-TRISO-Brennelementen abgeleitet. Bei diesen Heiztests wurden die Partikel über mindestens 100 Stunden bei 1.600°C geglüht und es wurden keine Defektpartikel detektiert. Durch zwei weitere Versuche, bei denen ebenfalls keine Defektpartikel detektiert wurden, wurde die statistische Basis verbessert. Der aus diesem Versuch abgeleitete Auslegungswert für den Störfallbedingten Partikelbruchanteil beruht allein auf der statistischen und konservativen Bewertung der endlichen Anzahl untersuchter Partikel [SIE1987].

In der Sicherheitsstudie für den HTR-Modul [SIE1988a] wurde aus diesen experimentellen Erkenntnissen eine konservative Abschätzung des Partikelbruchanteils in Abhängigkeit von der Brennstofftemperatur und dem Abbrand entwickelt (siehe Abbildung 4.15). Bei dieser aufgrund ihrer Form auch „Trompetenkurve“ genannten Funktion wird allerdings nicht berücksichtigt, wie lange das jeweilige Brennelement einer Temperaturbelastung ausgesetzt ist. Sobald die Brennelementtemperatur eine Temperaturgrenze überschreitet, wird angenommen, dass alle Schichten des Partikels ihre Rückhaltung verlieren [SIE1988a]. Die Kurven für die unterschiedlichen Abbrandzustände zeigen, dass bei dieser Abschätzung keine Abhängigkeit von der Temperatur bis zu einer Brennelementtemperatur von 1.200°C angenommen wird. Im Falle des HTR-Modul ist der Partikelbruchanteil somit im Normalbetrieb lediglich eine Funktion des Abbrandes. Vereinfachend wurde in konservativer Weise angenommen, dass der Partikelbruchanteil linear mit dem Abbrand ansteigt. Unter Störfallbedingungen dagegen ist der Partikelbruchanteil bei dieser Modellierung nicht abhängig vom Abbrandzustand.

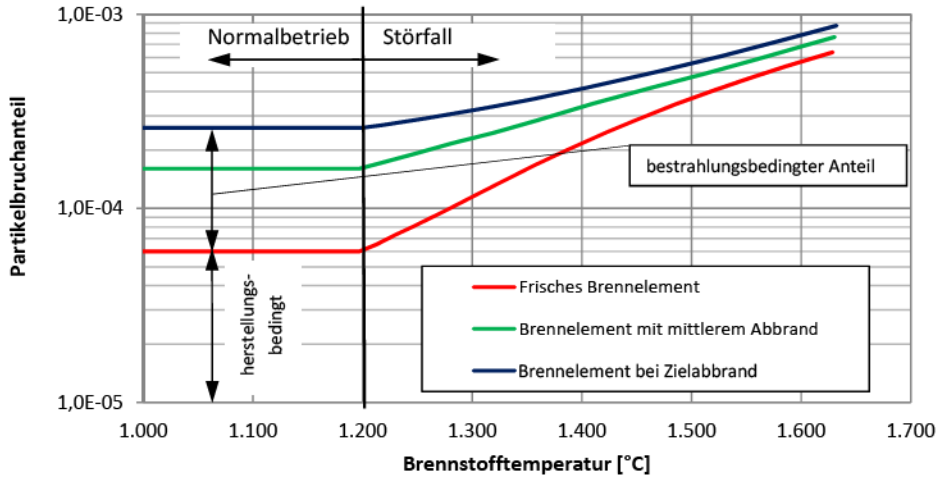


Abbildung 4.15: Partikelbruchanteil in Abhängigkeit von der Brennstofftemperatur und dem Abbrandzustand [SIE1988a] (eigene Darstellung)

4.2.2 Spaltproduktfreisetzung des Gleichgewichtscores

Freisetzung metallischer Spaltprodukte

Um die Spaltproduktfreisetzung des Gleichgewichtscores bei bestimmungsgemäßem Betrieb zu berechnen, wird das Freisetzungsverhalten von 4.500 repräsentativen Brennelementen im Core betrachtet. Bei dieser Brennelementanzahl sind die berechneten Ergebnisse repräsentativ für das gesamte Brennstoffvolumen. Simulationen haben gezeigt, dass eine Modellierung des Kugelfließverhaltens mit mehr Tracer-Brennelementen keine nennenswerte Auswirkung auf die Ergebnisse der Freisetzungsrechnung hat. Demnach werden nur die Ergebnisse der Spaltproduktfreisetzungsrechnungen basierend auf dem Modell M3 (siehe Abschnitt 4.1) dargestellt.

Als Grundlage der Diffusionsrechnung dienen die Diffusionskoeffizienten für „Germany“ aus IAEA-TECDOC-978 [IAE1997]. Des Weiteren wurden die in [SIE1987] getroffenen Annahmen bezüglich Urankontamination und Defektpartikel übernommen. Im Einklang zu der Interatom-Vorgehensweise unterscheidet die Freisetzungsrechnung bei Auslegungswerten sich lediglich durch konservative Annahmen bzgl. Partikelbruchanteile und Uran-Kontaminationswerte gegenüber einer Freisetzungsrechnung bei Erwartungswerten. Die mit STACY bestimmten Freisetzungsraten des Gleichgewichtscores wurden auf die thermische Leistung der Anlage bezogen und sind in der Tabelle 4.5 den in [SIE1987] veröffentlichten Daten gegenübergestellt. Die mit STACY simulierten spezifischen Freisetzungsraten von Cs-137, Sr-90 und Ag-110m sind im Vergleich zu den durch Interatom bestimmten Daten deutlich geringer.

Um die Unterschiede erklären zu können, muss die Vorgehensweise in [SIE1987] näher betrachtet werden. Für die Spaltproduktfreisetzungssimulation metallischer Spaltprodukte wurde *SLIPPER* eingesetzt [UHL1976]. *SLIPPER* wurde vor *FRESCO-I* und *FRESCO-II* am FZJ entwickelt. Die *SLIPPER* zugrunde liegende mathematische Modellierung des Spaltprodukttransports durch Fick'sche Diffusion ähnelt *FRESCO-II* und damit auch *STACY* stark. In *SLIPPER* wird der Spaltproduktquellterm

über die anteilige Spaltrate und die kumulative Spaltausbeute der einzelnen Spaltstoffnuklide errechnet [SIE1987].

Tabelle 4.5: Vergleich der spezifischen Freisetzungsraten von Sr-90, Cs-137 und Ag-110m im Gleichgewichtscore des HTR-Modul

Nuklid	Halbwertszeit	SLIPPER [SIE1987] (Interatom)		STACY (eigene Rechnung)		Verhältnis (STACY / SLIPPER)	
		Auslegungs- wert	Erwartungs- wert	Auslegungs- wert	Erwartungs- wert	Auslegungs- wert	Erwartungs- wert
		[Bq/(h·MW _{th})]	[Bq/(h·MW _{th})]	[Bq/(h·MW _{th})]	[Bq/(h·MW _{th})]	-	-
Sr-90	28,5 a	$2,4 \cdot 10^2$	$8,5 \cdot 10^1$	$7,0 \cdot 10^{-1}$	$3,1 \cdot 10^{-1}$	0,0029	0,0037
Cs-137	30,1 a	$5,9 \cdot 10^4$	$3,0 \cdot 10^4$	$2,7 \cdot 10^3$	$6,8 \cdot 10^2$	0,0452	0,0225
Ag-110m	250 d	$2,1 \cdot 10^3$	$1,1 \cdot 10^3$	$3,2 \cdot 10^1$	$3,1 \cdot 10^1$	0,0288	0,0152

Die Ermittlung der spezifischen Spaltproduktfreisetzungsrates der metallischen Spaltprodukte erfolgte für ein einzelnes Brennelement, wobei angenommen wurde, dass alle Abbrandzustände im Core mit der gleichen Häufigkeit auftreten. Unter dieser Annahme entspricht die zeitlich gemittelte Spaltproduktfreisetzungsrates des betrachteten kugelförmigen Brennelements der Freisetzungsrates aller Brennelemente im Core. Bei den langlebigen Nukliden wurde von einer Gleichverteilung des jeweiligen Nuklids im Gleichgewichtscore ausgegangen. Auf der Basis einer ORIGEN-Rechnung, mit der 15 Durchläufe simuliert werden, wurde der zeitliche Verlauf des Nuklidvektors für dieses Brennelement bestimmt [SIE1987]. Dabei wurde konservativerweise davon ausgegangen, dass das Brennelement bei jedem Durchlauf entlang der Mittelachse fließt [SIE1987]. Der schnelle Neutronenfluss in Abhängigkeit von der Zeit ist in Abbildung 4.16 dargestellt.

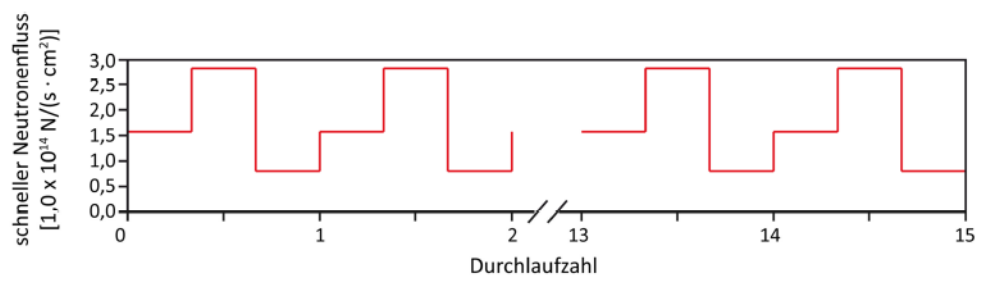


Abbildung 4.16: Eingangsdaten für den schnellen Neutronenfluss in der SLIPPER-Rechnung zur Berechnung der Spaltproduktfreisetzung des Gleichgewichtscores

Jeder Durchlauf wurde in drei Intervalle mit einem jeweils konstanten Neutronenfluss eingeteilt. Die mit THERMIX [BAN1983] ermittelte Temperaturkurve wurde auf ähnliche Art durch drei abschnittsweise konstante Temperaturen angenähert, siehe Abbildung 4.17. Die Lebenshistorie des Brennelements setzte sich aus 15 Durchläufen mit identischem zeitlichem Verlauf der Brennstofftemperatur und des Neutronenflusses zusammen.

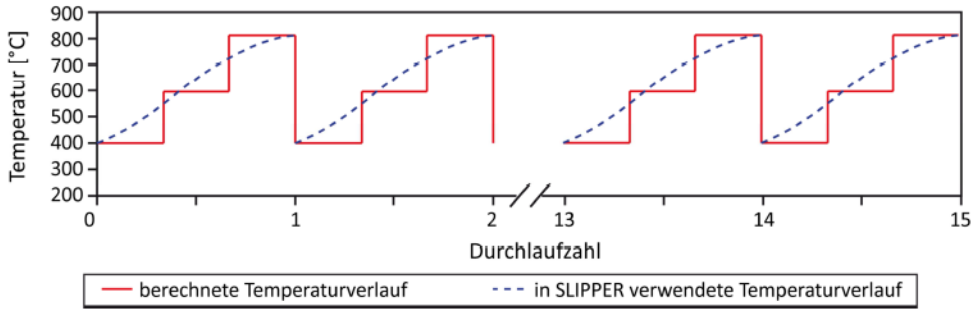


Abbildung 4.17: Eingangsdaten für die Brennstofftemperatur in der SLIPPER-Rechnung zur Berechnung der Spaltproduktfreisetzung des Gleichgewichtsscores

Der große Unterschied zur STACY-Rechnung ist die Betrachtung von lediglich einem Brennelement. Dadurch werden die unterschiedlichen Zustände, wie z. B. die zum Corerand abfallenden Temperaturen im Core, die einen großen Einfluss auf die Spaltproduktfreisetzung haben, vernachlässigt. Exemplarisch für die metallischen Spaltprodukte ist die Sr-90-Freisetzungsrate für zwei Extremfälle in Abbildung 4.18 dargestellt.

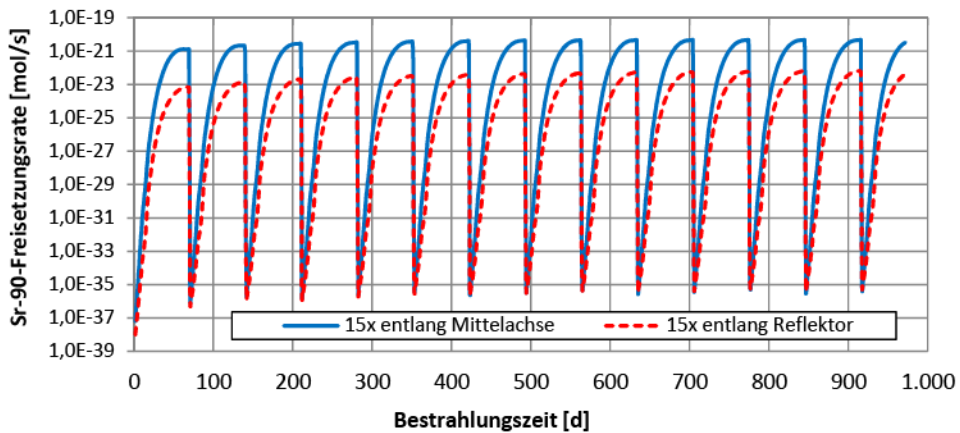


Abbildung 4.18: Zeitlicher Verlauf der Sr-90-Freisetzungsrate für ein Tracer-Brennelement, das nur entlang der Mittelachse bzw. nur entlang des Seitenreflektors fließt (Freisetzungsberechnung mit Erwartungswerten als Eingabe)

Im ersten Fall fließt das betrachtete Tracer-Brennelement ausschließlich durch den inneren Fließkanal (d.h. entlang der Mittelachse), im zweiten Fall nur durch den äußeren Fließkanal (d.h. entlang des Reflektors). Für beide Brennelemente wird ein individueller zeitlicher Temperaturverlauf entsprechend der jeweiligen radialen Position bestimmt. Dabei wurde vereinfachend angenommen, dass dem Brennelement bei jedem Durchlauf der gleiche zeitliche Verlauf der Zentraltemperatur aufgeprägt wird. Des Weiteren wurde in beiden Fällen angenommen, dass der bestrahlungsbedingte Partikeldefektanteil lediglich eine Funktion der Zeit ist. In der Rechnung wird somit vernachlässigt, dass das Brennelement, das nur entlang der Mittelachse fließt, aufgrund der höheren Temperatur und des größeren Neutronenflusses einen höheren Defektanteil im Vergleich zu dem Brennelement, das nur entlang des Reflektors fließt, aufweist.

Die zeitlichen Mittelwerte der Freisetzungsraten in den beiden Fällen liegen mehr als zwei Größenordnungen auseinander. Wie Abbildung 4.19 zeigt, hat die Trajektorie des Brennelements einen sehr großen Einfluss auf dessen mittlere Freisetzungsrates. Dies resultiert aus der aufgeprägten Temperatur und aus dem Aufbau des Spaltproduktinventars. Da die Spaltproduktfreisetzung im Normalbetrieb maßgeblich von der Urankontamination und dem Partikeldefektanteil beeinflusst wird, würde eine brennelementspezifische Berücksichtigung des bestrahlungsbedingten Partikeldefektanteils den Unterschied zwischen den beiden Extremverläufen weiter vergrößern. Bei Auslegungswerten liegt die angenommene Anzahl der Defektpartikel im Core höher als bei Erwartungswerten, wodurch die Unterschiede zwischen den beiden Extremfällen noch größer sind. Die große Abweichung der Ergebnisse zwischen STACY und SLIPPER erscheint somit plausibel. Hieraus wird ersichtlich, dass die Vorgehensweise in [SIE1987] im Falle des Gleichgewichtscore eine sehr konservative Abschätzung liefert.

Abbildung 4.19 zeigt die räumliche Aufteilung der spezifischen Sr-90-Freisetzungsrates des Gleichgewichtscore. Für jede Region wurde auf Basis der Freisetzungsrates alle in der Region vorhandenen Tracer-Brennelemente eine mittlere Freisetzungsrates bestimmt (siehe Abschnitt 3.5). Die Regionen unterschiedlicher Kanäle müssen nicht unbedingt identisches Volumen haben. Damit die Werte vergleichbar sind, werden die volumenspezifischen Freisetzungsrates gegenübergestellt.

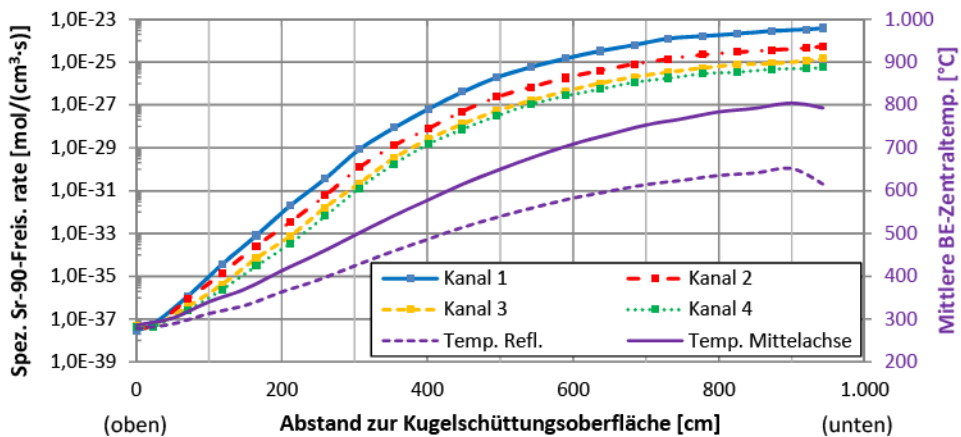


Abbildung 4.19: Räumlich aufgelöste spezifische Sr-90-Freisetzungsrates im HTR-Modul-Gleichgewichtscore bei Erwartungswerten

Das Inventar für jedes Brennelement nimmt wegen der Langlebigkeit des Nuklids mit der Bestrahlungszeit im Core stetig zu⁶. Bedingt durch die nominelle Durchlaufzahl von 15 liegen in jeder Region sehr unterschiedliche Abbrandzustände vor und das Sr-90-Inventar ist weitgehend homogen über das Core verteilt. Somit nimmt das mittlere Sr-90-Inventar je Brennelement nur geringfügig von oben nach unten zu. Die Aufteilung der Gesamtfreisetzung hängt demnach hauptsächlich von der Brennstofftemperaturverteilung ab. Da die Temperaturen im unteren Teil des Cores am höchsten sind, liegt auch das Maximum der spezifischen Freisetzungsrates in jedem Kanal in diesem Bereich. Radial gesehen ist die Temperatur im innersten Kanal (Kanal 1) am höchsten, wodurch die Freisetzungsrates hier den Maximalwert aufweist.

⁶ Bei Vernachlässigung des radioaktiven Zerfalls zwischen zwei Durchläufen

Iod-131-Freisetzung

STACY kann nicht nur die Freisetzung von langlebigen Nukliden berechnen, sondern auch von kurzlebigen, wie z. B. Iod-131 (I-131). In Abbildung 4.20 sind die räumlich aufgelösten spezifischen I-131-Freisetzungsraten des Gleichgewichtscore dargestellt. Im Gegensatz zu den langlebigen Spaltprodukten liegt das Maximum der I-131-Freisetzung nicht im unteren Teil des Cores, sondern im Bereich des maximalen thermischen Neutronenflusses in Coremitte. Aufgrund der geringen Halbwertszeit nimmt das I-131-Inventar in der unteren Corehälfte mit zunehmendem Weg durch das Core stärker ab als es durch Spaltung aufgebaut wird. Im unteren Corebereich, wo höhere Brennstofftemperaturen vorliegen, steht somit ein geringeres Inventar an I-131 für eine Freisetzung zur Verfügung. Im oberen Corebereich sind sowohl Inventar als auch die Temperaturen geringer, so dass die spezifische I-131-Freisetzungsraten in diesem Bereich am geringsten ist. Aufgrund der Kurzlebigkeit des I-131 ist das Verhältnis zwischen maximaler und minimaler Freisetzungsraten mit einem Wert von ungefähr sechs gering.

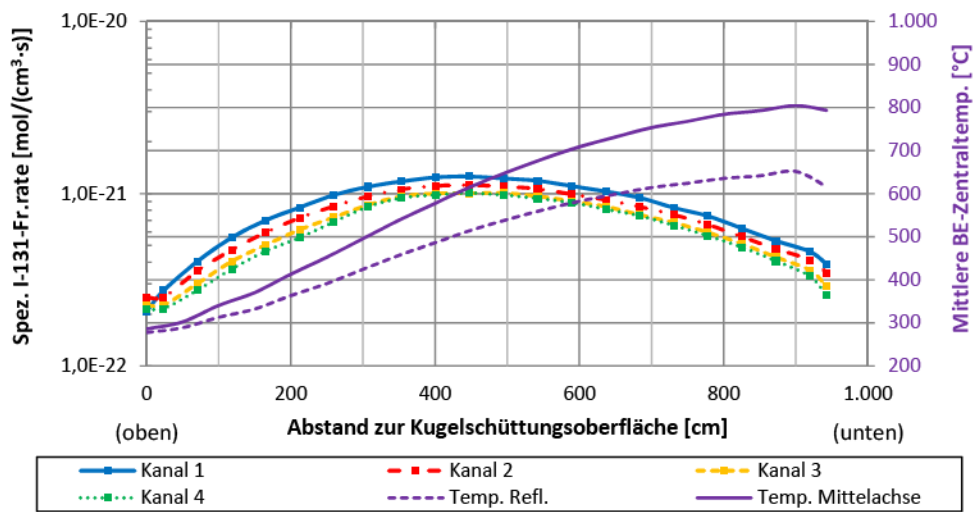


Abbildung 4.20: Räumlich aufgelöste spezifische I-131-Freisetzungsraten im HTR-Modul-Gleichgewichtscore bei Erwartungswerten

Tabelle 4.6 zeigt, dass die mit STACY berechneten Freisetzungswerte um etwa 3,7 (Auslegungswert) und 1,4 (Erwartungswert) unter den von Interatom berechneten Werten liegen.

Tabelle 4.6: Vergleich der spezifischen Freisetzungsraten von I-131 im Gleichgewichtscore

Nuklid	Halbwertszeit	STADIF [SIE1987] (Interatom)		STACY (eigene Rechnung)		Verhältnis (STACY / STADIF)	
		Auslegungswert	Erwartungswert	Auslegungswert	Erwartungswert	Auslegungswert	Erwartungswert
		[Bq/(h·MW _{th})]	[Bq/(h·MW _{th})]	[Bq/(h·MW _{th})]	[Bq/(h·MW _{th})]	-	-
I-131	8,04 d	3,8 · 10 ⁶	9,5 · 10 ⁵	1,0 · 10 ⁶	6,5 · 10 ⁵	0,27	0,69

Für die Berechnung der stationären Freisetzung von Iod-Isotopen und Edelgasen bei bestimmungsgemäßem Betrieb wurde von Interatom der FZJ-Code *STADIF* [MUE1977] eingesetzt. *STADIF* kann nur für Nuklide, die aufgrund ihrer kurzen Halbwertszeit im stationären Gleichgewicht vorliegen, eingesetzt werden. Mit der Leistungsverteilung und der Oberflächentemperaturverteilung wurde programmintern die räumliche Verteilung der Zentraltemperaturen im Core bestimmt. Das Core wurde in der Studie in sechs axiale, äquidistante Zonen eingeteilt, wobei jede Zone durch ein charakteristisches Brennelement dargestellt wurde [SIE1987]. Entsprechend konservativer Betrachtung wurde dabei der radiale Leistungsdichteabfall nicht berücksichtigt [SIE1987]. Die in der Berechnung genutzten Daten sind in Anhang 22 dargestellt.

Abbildung 4.21 zeigt den Vergleich zwischen der in der Interatom-Studie angenommenen Leistungsverteilung und der im Rahmen dieser Arbeit mit VSOP berechneten Leistungen. Die Leistung der Batches mit geringer Durchlaufzahl liegt deutlich über dem angenommenen Leistungsprofil. Auch die mittlere Leistung aller Batches liegt in der eigenen VSOP-Rechnung deutlich oberhalb des angenommenen Profils, während das axiale Leistungsprofil, bei einem Radius von 75 cm (grüne Kurve), die angenommene Funktion sehr viel besser trifft.

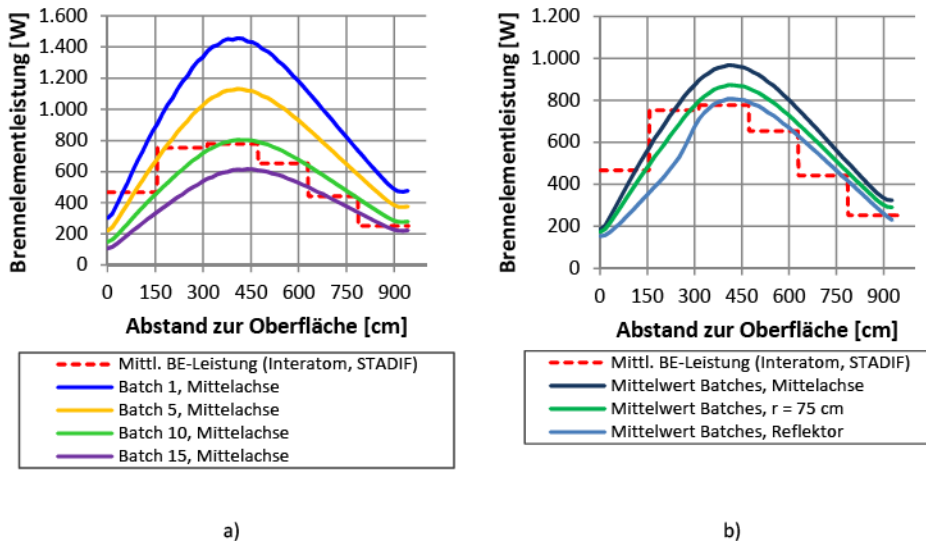


Abbildung 4.21: a) Brennelementleistung entlang der Mittelachse für Batches mit unterschiedlicher Durchlaufzahl (VSOP) im Vergleich zu der von Interatom angenommenen Leistungsverteilung
b) Vertikales gemitteltes Brennelementleistungsprofil aller Batches an drei radialen Positionen

Ein Vergleich der Oberflächentemperaturen ist in Anhang 22 gegeben. Die Abbildung zeigt, dass die von Interatom angenommenen Temperaturen mit den in STACY verwendeten vergleichbar sind.

4.2.3 Spaltproduktfreisetzung in der Kernaufheizphase nach DLOFC

Bevor die mit STACY berechneten Freisetzungsergebnisse vorgestellt werden, wird für eine bessere Vergleichbarkeit zuerst die von Interatom gewählte Vorgehensweise zusammengefasst. Die Spaltproduktfreisetzung in der Kernaufheizphase wurde von Interatom mit FRESKO-I [SIE1988] berechnet. Dabei wurde das Rechengitter in 11 axiale und 6 radiale Maschen unterteilt [SIE1988a]. Für jede dieser Maschen wird ein repräsentatives Brennelement im Verlaufe der Temperaturtransiente betrachtet.

Analog zu FRESKO-II (siehe Abschnitt 1.4.2) wird in FRESKO-I die stetig steigende Partikelbruchanteilkurve durch einen stufenförmigen Verlauf diskretisiert. Dabei kann für jede Masche der gleiche stufenförmige Verlauf zur Beschreibung des zeitlichen Verlaufs der Partikelbruchanteile verwendet werden, da in FRESKO-I nur ein repräsentatives Brennelement mit einem mittleren Abbrandzustand je Masche berücksichtigt wird. Der Partikelbruchanteil ist demnach nur noch von der Brennstofftemperatur abhängig. In Abbildung 4.22 sind die von Interatom in der FRESKO-I-Rechnung verwendeten Partikelbruchanteile dargestellt. Die Partikelbruchanteile bei Auslegungswerten sind ein in Stufen unterteiltes Äquivalent der Trompetenkurve (siehe Abschnitt 4.2.1). Die Partikelbruchanteile bei Erwartungswerten sind deutlich geringer. So beträgt der störfallbedingte Partikelbruchanteil bei den Erwartungswerten 10 % der Auslegungsdaten.

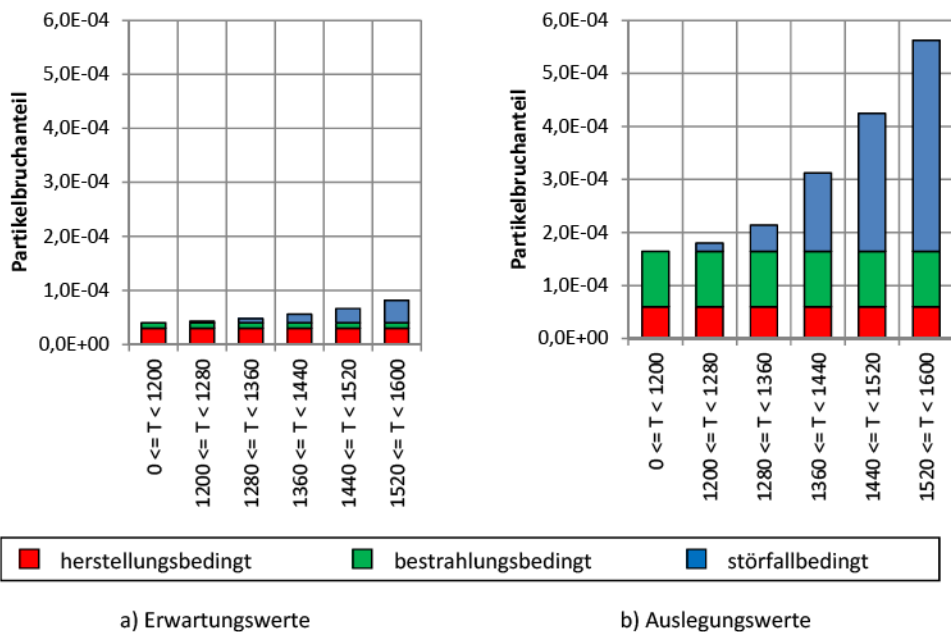


Abbildung 4.22: Modellierung des Partikelbruchanteils in Abhängigkeit von der Störfalltemperatur in FRESKO-I [SIE1988a] (eigene Darstellung)

Nach [SIE1987] ist bei einer maximalen Brennelementtemperatur von 1.550° ein Zuschlag von 70°C erforderlich, um die Unsicherheiten in den Eingangsgrößen zu berücksichtigen. Zur Berechnung der Spaltproduktfreisetzung würden allerdings ältere Temperaturrechnungen verwendet, die sich von den in [SIE1987] dargestellten Rechnungen im Wesentlichen durch eine niedrigere Ausgangsleistung

unterscheiden (d. h. 100 Nennleistung, anstelle von 105 Nennleistung) [SIE1988a]. Um diese Auslegungstemperaturen zu erreichen, müssen die Temperaturen der älteren Rechnung mit 90°C Zuschlag versehen werden. Um eine bessere Vergleichbarkeit mit den von Interatom-Daten zu ermöglichen, wurde auch in STACY mit einer Ausgangsleistung von 100 gerechnet, wobei sowohl Rechnung mit nominellen Temperatur, d. h. ohne Zuschlag, und Rechnungen mit einem Zuschlag von 90°C durchgeführt werden.

Simulationen mit Partikelbruchanteil nach Trompetenkurve

Um einen Vergleich von STACY-Ergebnissen mit früheren Studien [SIE1988a] zu ermöglichen, wird die Trompetenkurve als Basis für die Partikelbruchanteile in der Freisetzungsrechnung genutzt.

Aufgrund der Tatsache, dass in STACY sowohl Temperatur- als auch Abbrandabhängigkeit berücksichtigt werden, gibt es für jedes Tracer-Brennelement einen individuellen zeitlichen Verlauf des Partikelbruchanteils. Für jedes Tracer-Brennelement wird dieser Verlauf programmintern diskretisiert. Deshalb wurde auf Basis der originalen Trompetenkurve bei Auslegungswerten und den Eingangsdaten der damaligen FRESCO-I-Rechnung ein Äquivalent der Trompetenkurve für Erwartungsdaten bestimmt.

Die in Abbildung 4.23 als Säulendiagramm dargestellten Partikelbruchanteile gelten für einen mittleren Abbrandzustand und sind identisch zu Abbildung 4.22a. Die stetige Kurve bei einem Abbrand von 50 des Zielabbrands wird durch die Mittelpunkte einer jeden Säule gelegt. Der Verlauf bei einem frischen bzw. abgebrannten Brennelement entsteht bei einer vertikalen Verschiebung des Verlaufs bei 50 Abbrand um die Hälfte des bestrahlungsbedingten Anteils nach unten bzw. nach oben. Der bestrahlungsbedingte Anteil steigt linear mit dem Abbrand an. Das Ergebnis ist das Äquivalent der Trompetenkurve bei Erwartungsdaten.

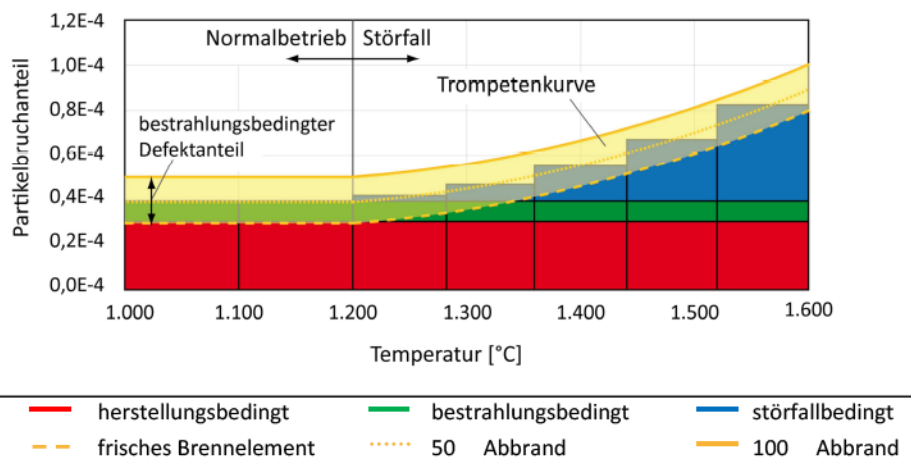


Abbildung 4.23: Überlagerung angenommener Partikelbruchanteile (Erwartungswerte) in Interatom-Rechnung (FRESCO) und daraus entwickeltes Äquivalent der Trompetenkurve (eigene Abbildung)

Mit Hilfe der Trompetenkurve bei Auslegungs- und Erwartungswerten wurden die Freisetzungsraten für Cs-137, Sr-90, I-131 und Ag-110m berechnet. Am Beispiel Cs-137 werden die Rechenergebnisse

für die metallischen Nuklide genauer diskutiert. Die räumlich aufgelösten spezifischen Cs-137 Freisetzungsraten bei Auslegungswerten sind in Abbildung 4.24 dargestellt.

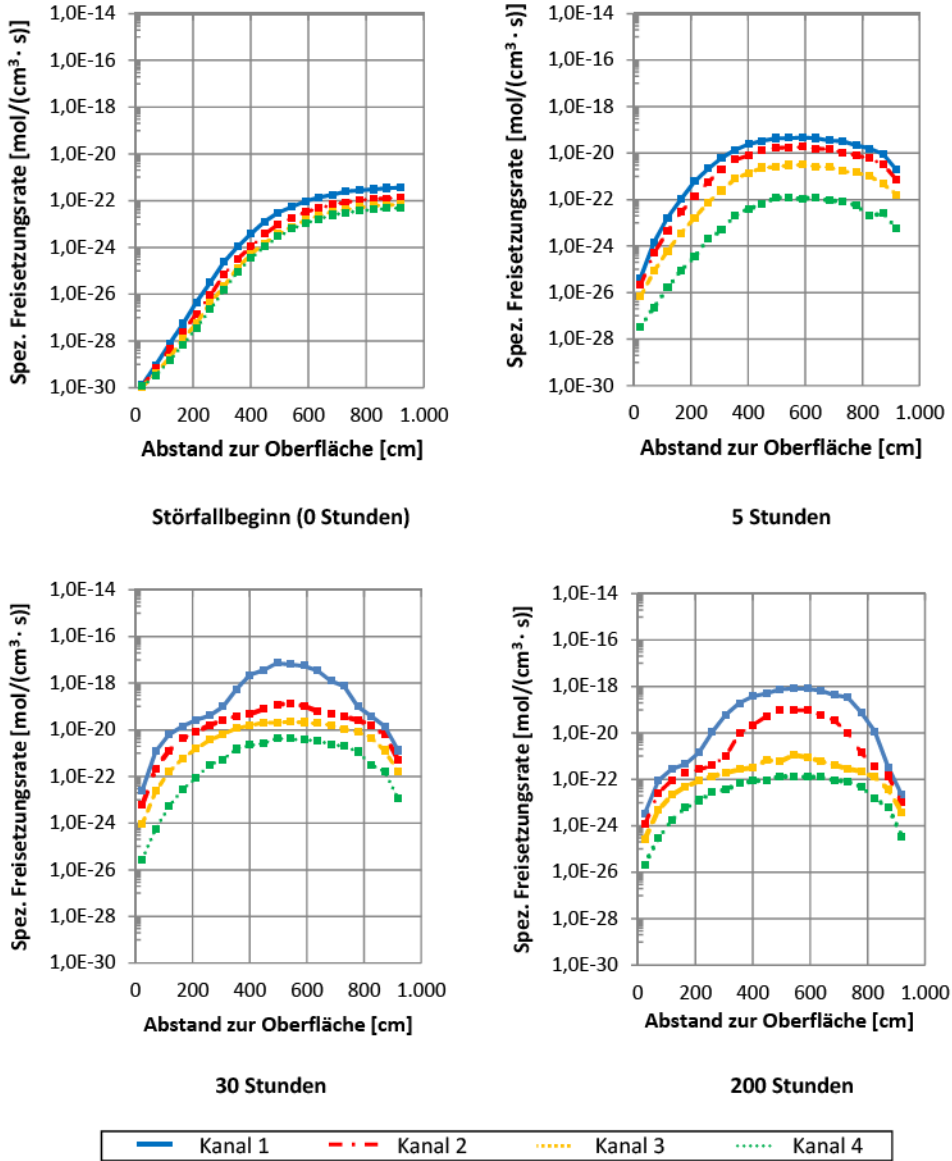


Abbildung 4.24: Räumlich aufgelöste spezifische Cs-137-Freisetzungsrates für verschiedene Zeitpunkte in der Kernaufheizphase bei Auslegungswerten und nominellen Temperaturverhältnissen (Markierungen sind tatsächlich berechnete, für eine Region repräsentative Werte)

Zu Störfallbeginn ist die Freisetzungsrates im unteren Teil des inneren Kanals wegen der dort zunächst höheren Brennstofftemperaturen am höchsten. Zugleich ist der mittlere Abbrand in diesem Bereich am höchsten, wobei die Unterschiede aufgrund der hohen Durchlaufzahl gering sind. Während der

Kernaufheizphase nach der Druckentlastung des Primärkreises wandert das Maximum der Brennstofftemperaturen aufgrund der vorher beschriebenen Effekte im Vergleich zu Störfallbeginn nach oben. In gleichem Maße wandert auch der Ort der maximalen spezifischen Freisetzungsrates nach oben.

Wie Abbildung 4.24 zeigt, sind die volumenspezifischen Freisetzungsrates im gesamten Core nach fünf Stunden um etwa zwei Größenordnungen angestiegen und die räumlichen Verhältnisse bezüglich der Aufteilung der Gesamtfreisetzungsrates haben sich deutlich geändert. Nach etwa 30 Stunden wird das Maximum der Brennelementtemperaturen erreicht. Zu diesem Zeitpunkt wird die Gesamtfreisetzungsrates von den Brennelementen im mittleren Teil des inneren Kanals (Kanal 1) dominiert. Danach fallen die Temperaturen in den Bereichen mit stark erhöhten Temperaturen wieder ab, so dass gegen Ende des Betrachtungszeitraums (200 h) auch die Freisetzungsrates in allen Bereichen gesunken sind. Die räumliche Verteilung des Partikelbruchanteils und ihre zeitliche Entwicklung im druckentlasteten Core ist in Abbildung 4.25 und 4.26 dargestellt.

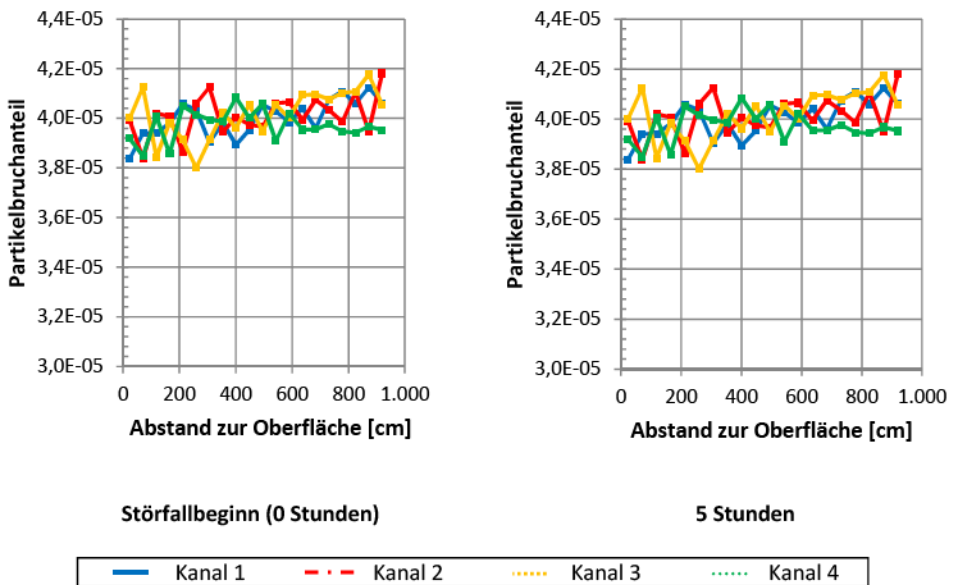


Abbildung 4.25: Räumlich aufgelöster Partikelbruchanteil für verschiedene Zeitpunkte nach Druckentlastung bei Auslegungsdaten und nominellen Temperaturverhältnissen

Die Abbildung 4.25 zeigt, dass sich die räumliche Verteilung der Partikelbruchanteile während den 5 Stunden nach Störfallbeginn nicht wesentlich ändert. Wie vorher in Abschnitt 4.1.2 diskutiert, wandert die Stelle der maximalen Brennstofftemperatur während den ersten Stunden von unten zur Mitte. Die Temperatur auf mittlerer Corehöhe steigt somit an und es dauert wenige Stunden bis eine Temperatur von 1.200°C erreicht wird, bei der laut Trompetenkurve ein erster störfallbedingter Partikelbruchanteil auftritt. Die Fluktuationen, die in jedem Teildiagramm zu erkennen sind, werden durch die begrenzte Anzahl von Tracer-Brennelementen bedingt. Bei einer Erhöhung dieser Anzahl würden die Fluktuationen weiter verringert werden. Rechenergebnisse wie z. B. die Gesamtfreisetzungsrates, werden hierdurch allerdings nicht beeinflusst.

Wie die Abbildung 4.26 zeigt, gibt es geringe Fluktuationen beim Partikelbruchanteil im Core von oben nach unten. Diese liegt in der begrenzten Anzahl betrachteter Tracer-Brennelemente begründet. Eine Tendenz zu etwas höheren Partikelbruchanteilen im unteren Corebereich, bedingt durch den höheren mittleren Abbrand, ist aber erkennbar. Die Unterschiede zwischen den einzelnen Kanälen sind nicht sehr ausgeprägt. In den ersten Stunden nach der Druckentlastung ist die Änderung der Partikelbruchanteile bezogen auf die Verteilung der Partikelbruchanteile im Gleichgewichtscore gering. Bis zum Zeitpunkt mit der höchsten maximalen Brennstofftemperatur (30 Stunden) ist die Anzahl an Defektpartikeln in den beiden inneren Kanälen deutlich gestiegen. Danach sinken die Temperaturen im Reaktorcore, so dass die Anzahl an Defektpartikeln ab diesem Zeitpunkt laut Trompetenkurve unverändert bleibt.

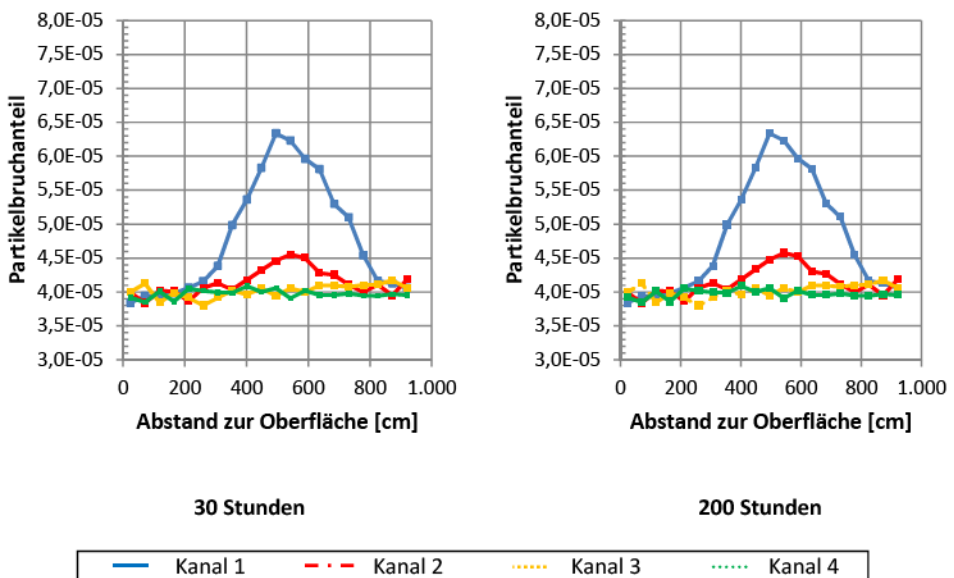


Abbildung 4.26: Räumlich aufgelöster Partikelbruchanteil für verschiedene Zeitpunkte nach Druckentlastung bei Auslegungsdaten und nominellen Temperaturverhältnissen

Abbildung 4.27 zeigt die zeitliche Entwicklung der Cs-137-Freisetzungsrate für verschiedene Rechenfälle. In Anlehnung zu den Interatom-Rechnungen wird sowohl mit nominellen Brennstofftemperaturen als auch mit um 90°C erhöhten Brennstofftemperaturen gerechnet. Je konservativer die Annahmen, desto früher wird die maximale Cs-137-Freisetzungsrate erreicht. Im Einklang zu den Rechnungen von Siemens-Interatom [SIE1988b] wurde sowohl mit nominellen Temperaturen als auch um 90°C erhöhten Brennstofftemperaturen gerechnet. Dieser Temperaturzuschlag ist für das gesamte Brennstoffvolumen gleich.

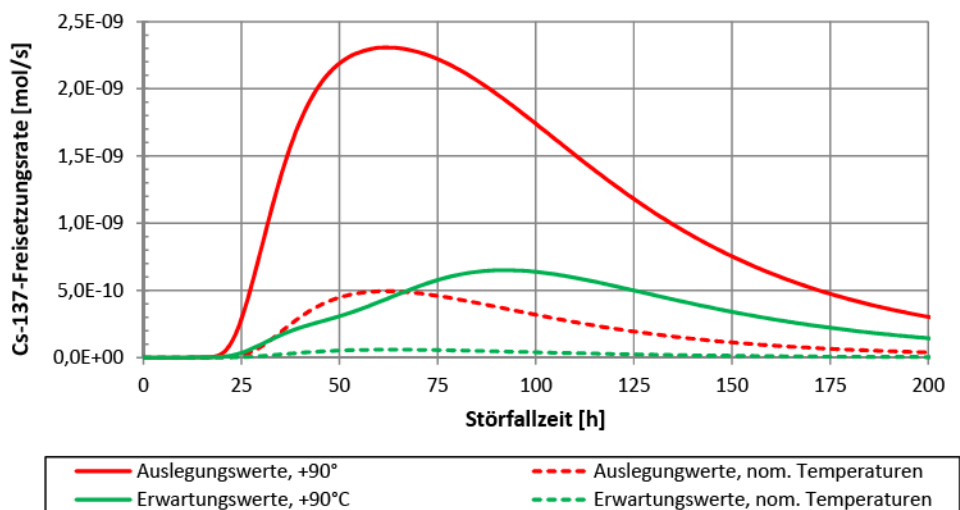


Abbildung 4.27: Cs-137-Freisetzungsphase im druckentlasteten Core für verschiedene Fälle (Auslegungs- und Erwartungswerte, nominelle Temperaturen und um 90°C erhöhte Temperaturen)

Um einen Vergleich mit den Interatom-Daten zu ermöglichen, ist es notwendig, andere Größen heranzuziehen. Der kumulative Freisetzungsanteil „ R_{frei} “ für ein Nuklid ist das Verhältnis der im Zeitraum Δt integral freigesetzten zur insgesamt entstandenen Spaltproduktmenge, abzüglich der in Δt zerfallenen Nuklide [SIE1987]:

$$R_{\text{frei}}(t) = \frac{\int_0^t FR(t) \cdot e^{-\lambda \cdot t}}{\int_0^t \dot{Q}(t) \cdot e^{-\lambda \cdot t}} \quad 4.3$$

mit:	FR	- Freisetzungsrate	[mol/s]
	\dot{Q}	- Bildungsrate	[mol/s]
	λ	- Zerfallskonstante	[1/s]

In Abbildung 4.28 sind die mit STACY ermittelten Freisetzungsverläufe für Cs-137, Sr-90 und I-131 den mit FRESCO-I ermittelten Verläufen aus [SIE1988a] gegenübergestellt. Trotz identischer Annahmen, u. a. für Diffusionskoeffizienten und Uranverunreinigungen, liefern beide Ansätze unterschiedliche Ergebnisse. Durch die Berücksichtigung verschiedener Abbrandzustände fallen die mit STACY ermittelten Freisetzungsraten für Sr-90 und Cs-137 geringer aus.

Abbildung 4.29 zeigt den Vergleich des mit STACY berechneten Ag-110m-Freisetzungsverlaufs mit dem von Interatom bestimmten Verlauf bei Auslegungswerten und einem Temperaturzuschlag von 90 K. Die Kurven weisen einen sehr vergleichbaren Verlauf auf. Von der IAEA wird ein im Vergleich zum HBK-Datensatz um Faktor 10 erhöhter Frequenzfaktor beim Diffusionskoeffizient von Ag-110m in UO_2 empfohlen. Um den Einfluss dieses geänderten Diffusionskoeffizienten zu bewerten, werden die verschiedenen Rechenfälle mit beiden Diffusionskoeffizienten durchgeführt. Abbildung 4.29 zeigt, dass sich dies nur am Anfang des Störfalls bemerkbar macht. Diese Änderung des Diffusionskoeffizienten beeinflusst die relative kumulative Freisetzung am Ende des Störfalls nur unwesentlich.

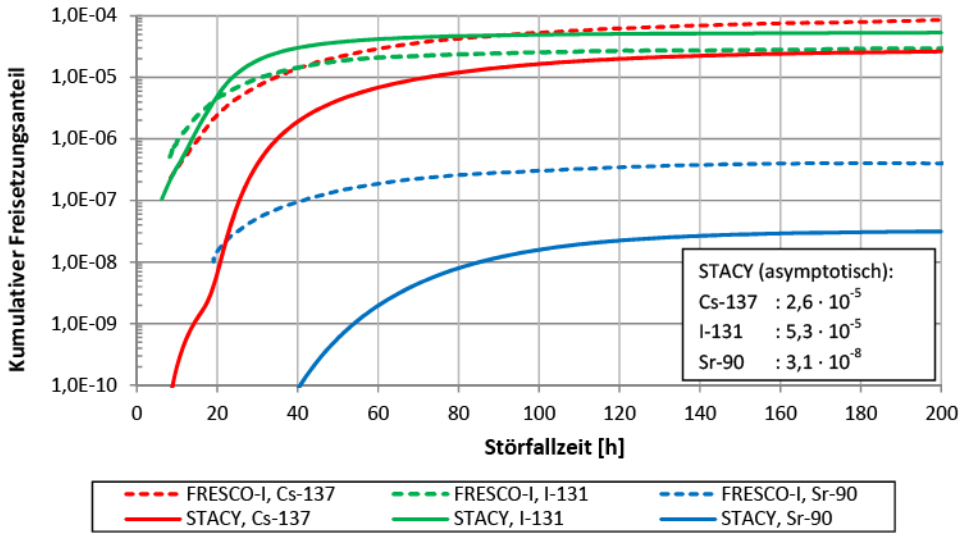


Abbildung 4.28: Vergleich der kumulativen Freisetzungssanteile (ohne Berücksichtigung von Zerfall) in der Kernaufheizphase des HTR-Modul nach Interatom [SIE1988a] und STACY, Auslegungsdaten mit einem Temperaturzuschlag von 90°C

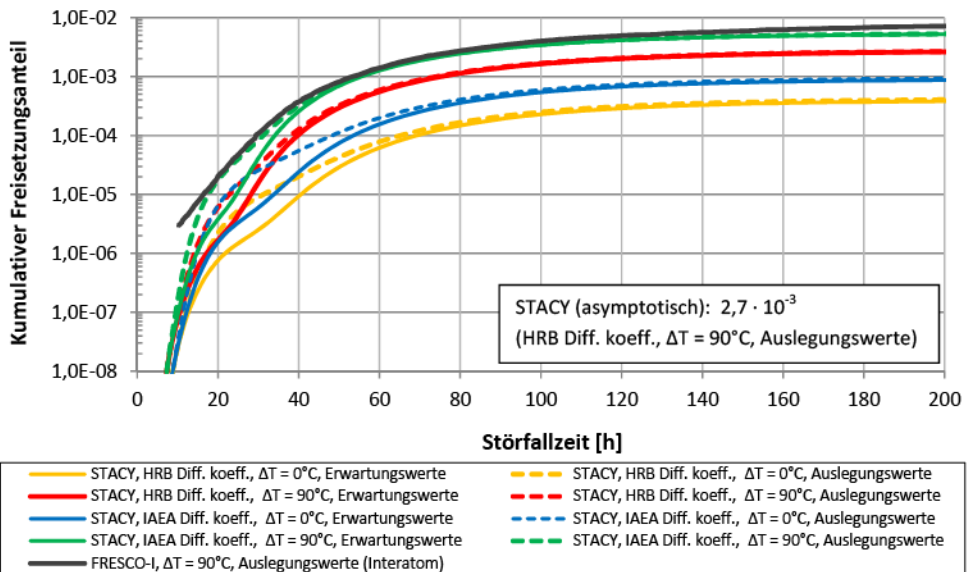


Abbildung 4.29: Vergleich der relativen kumulativen Freisetzungssanteile für zwei Datensätze mit Diffusionskoeffizienten für sowohl Erwartungswerte als auch Auslegungswerte (ΔT : Sicherheitszuschlag bei den Brennstofftemperaturen)

Die kumulierte Corefreisetzung nach 200 Stunden ist in Tabelle 4.7 dargestellt. Obwohl die Rechenergebnisse mit einer hohen Genauigkeit vorliegen, werden sie aufgrund der Unsicherheiten mit einer Nachkommastelle dargestellt. Die Verhältnisse der kumulativen Freisetzungssanteile berechnet nach beiden Ansätzen sind ähnlich für die verschiedenen Rechenfälle. Man erkennt, dass der Freisetzung-

santeil bei den metallischen Spaltprodukten im Vergleich zu der früheren Studie deutlich abnimmt. Je nach Rechenfall ist der Freisetzungsanteil für Cs-137 um den Faktor 3 bis 15, für Sr-90 um den Faktor 11 bis 65 geringer. Für I-131 dagegen ist der mit STACY berechnete Freisetzungsanteil um den Faktor 2 höher.

Tabelle 4.7: Vergleich der kumulierten Freisetzungen und relativen Freisetzungsanteile nach 200 Stunden nach dem STACY und FRESKO-I [SIE1988a] für verschiedene Rechenfälle

Nuklid		Auslegung				Erwartung			
		+90°C		Nominaltemperatur		+90°C		Nominaltemperatur	
		STACY	FRESKO-I	STACY	FRESKO-I	STACY	FRESKO-I	STACY	FRESKO-I
kumulierte Freisetz. [Bq]	Cs-137	$4,4 \cdot 10^{11}$	$1,4 \cdot 10^{12}$	$7,9 \cdot 10^{10}$	$3,8 \cdot 10^{11}$	$1,3 \cdot 10^{11}$	$8,5 \cdot 10^{11}$	$1,0 \cdot 10^{10}$	$1,5 \cdot 10^{11}$
	Sr-90	$4,2 \cdot 10^8$	$5,6 \cdot 10^9$	$2,5 \cdot 10^7$	$1,7 \cdot 10^9$	$3,8 \cdot 10^8$	$4,3 \cdot 10^9$	$2,5 \cdot 10^7$	$8,5 \cdot 10^8$
	Ag-110m	$5,0 \cdot 10^{11}$	$1,3 \cdot 10^{12}$	$7,7 \cdot 10^{10}$	$1,3 \cdot 10^{12}$	$5,0 \cdot 10^{10}$	$2,4 \cdot 10^{11}$	$7,2 \cdot 10^{10}$	$2,3 \cdot 10^{11}$
	I-131	$1,1 \cdot 10^{13}$	$5,9 \cdot 10^{12}$	$4,2 \cdot 10^{12}$	$2,4 \cdot 10^{12}$	$1,9 \cdot 10^{12}$	$1,0 \cdot 10^{12}$	$6,7 \cdot 10^{11}$	$2,3 \cdot 10^{11}$
Relativer Freisetzungsanteil	Cs-137	$2,6 \cdot 10^{-5}$	$8,4 \cdot 10^{-5}$	$4,8 \cdot 10^{-6}$	$8,4 \cdot 10^{-5}$	$7,8 \cdot 10^{-6}$	$5,1 \cdot 10^{-5}$	$6,0 \cdot 10^{-7}$	$9,0 \cdot 10^{-6}$
	Sr-90	$3,5 \cdot 10^{-8}$	$4,0 \cdot 10^{-7}$	$2,1 \cdot 10^{-9}$	$4,0 \cdot 10^{-7}$	$3,2 \cdot 10^{-8}$	$3,1 \cdot 10^{-7}$	$2,1 \cdot 10^{-9}$	$6,2 \cdot 10^{-8}$
	Ag-110m	$2,6 \cdot 10^{-5}$	$7,1 \cdot 10^{-3}$	$4,0 \cdot 10^{-6}$	$7,0 \cdot 10^{-3}$	$2,6 \cdot 10^{-5}$	$1,2 \cdot 10^{-3}$	$3,3 \cdot 10^{-6}$	$1,2 \cdot 10^{-3}$
	I-131	$5,3 \cdot 10^{-5}$	$2,9 \cdot 10^{-5}$	$2,0 \cdot 10^{-5}$	$1,2 \cdot 10^{-5}$	$5,0 \cdot 10^{-6}$	$9,1 \cdot 10^{-6}$	$3,2 \cdot 10^{-6}$	$1,1 \cdot 10^{-6}$

Um die Unterschiede bei den Rechenergebnissen deuten zu können, ist ein Vergleich der Berechnungsmethoden notwendig. Eine Reihe von Änderungen wurden am Originalprogramm FRESKO-I zur Simulation des HTR-Modul von Interatom vorgenommen [ANT1987]. Die vereinfachte Berechnung der räumlichen Inventarverteilung zu Störfallbeginn bleibt auf der Liste mit Änderungen in [ANT1987] unerwähnt. Demnach wird davon ausgegangen, dass diese Unterfunktion nicht modifiziert wurde und die Funktionalität des Originalcodes benutzt wurde.

Obwohl die Original-FRESKO-I-Rechnung nicht wiederholt werden kann, wird der Formalismus der Inventarverteilung im HTR-Modul zu Störfallbeginn nachvollzogen. Abbildung 4.30 zeigt den Vergleich der räumlichen Verteilung des I-131-Inventars je Brennelement nach ORIGEN-Juel und FRESKO-I. Dabei gilt die ORIGEN-Juel-Rechnung als Referenz, weil bei diesem Programm die MEDUL-Beschickung im Gegensatz zu FRESKO-I in korrekter Weise berücksichtigt wird. In der STACY-Rechnung werden die Nuklidinventare für jedes Tracer-Brennelement einzeln bestimmt. Die STACY-Inventare weisen ähnliche Fluktuationen auf wie die vorher gezeigten Fluktuationen bei den Partikelbruchanteilen in Abbildung 4.26. Zur besseren Darstellung sind anstelle dieser Inventare die ORIGEN-Inventare dargestellt. Bei FRESKO-I wird je Masche nur ein repräsentatives Brennelement betrachtet. In STACY werden allerdings viele verschiedene Abbrandzustände berücksichtigt. Wie die Abbildung zeigt, wird das Inventarmaximum beim ersten Durchlauf, bedingt durch die mit jedem Durchlauf abnehmende Leistung und der Kurzlebigkeit des Iod-Isotops, erreicht. Dabei weicht die räumliche Verteilung des Inventars gegenüber dem FRESKO-I-Ansatz erheblich ab. Die Inventare sind in der oberen Hälfte geringer und im unteren Bereich höher. Wie in Abschnitt 4.1.2 beschrieben, wandert die Position der maximalen Temperatur im Störfall vom unteren Bereich bis etwa zur

Coremitte. Das größere Inventar in den heißeren Bereichen des Cores führt zu einer höheren Freisetzungsrates.

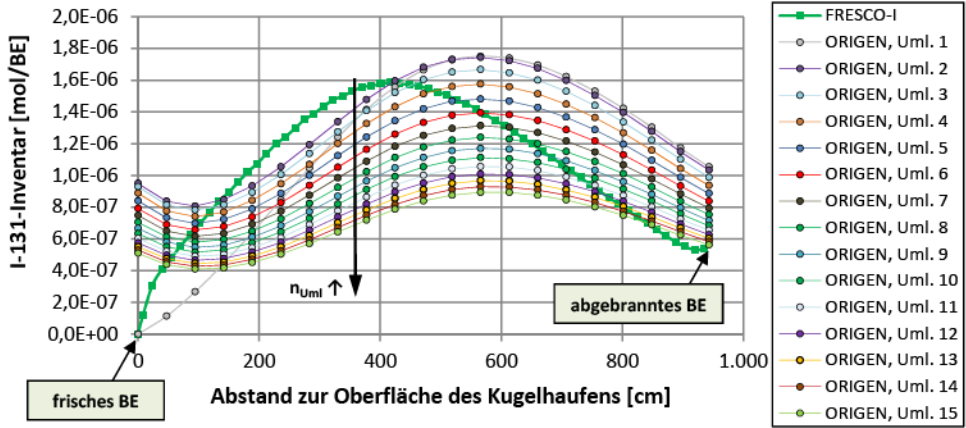


Abbildung 4.30: I-131-Inventar eines Brennelements im inneren Kanal nach FRESKO-I und ORIGIN-Juel 99/09, wobei bei ORIGIN-Juel zwischen verschiedenen Durchläufen differenziert wird

Im Gegensatz dazu sieht eine analoge Gegenüberstellung für Cs-137 anders aus. Die Inventare nach der ORIGIN- und FRESKO-I-Rechnung sind in Abbildung 4.31 dargestellt.

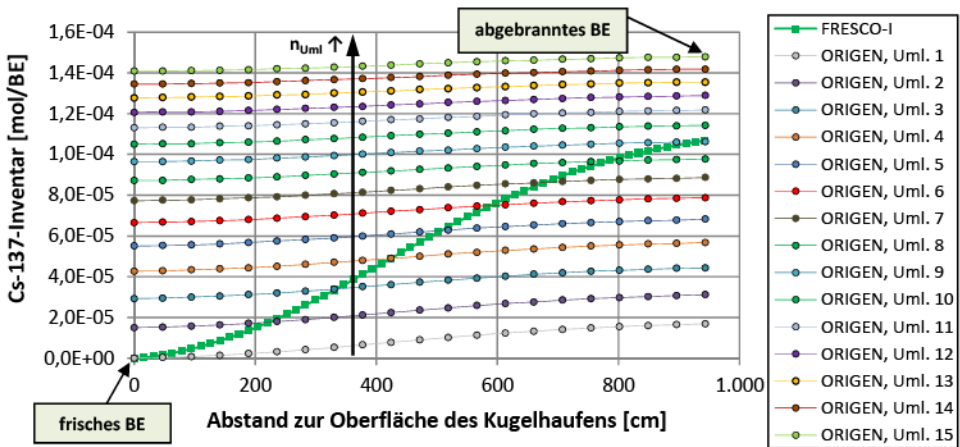


Abbildung 4.31: Cs-137-Inventar eines Brennelements im inneren Kanal nach FRESKO-I und ORIGIN-Juel 99/09, wobei bei ORIGIN-Juel zwischen verschiedenen Durchläufen differenziert wird

Aufgrund der Langlebigkeit dieses Isotops nimmt dessen Inventar mit zunehmender Durchlaufzahl stetig zu. Das Inventar wird durch den FRESKO-I-Ansatz im oberen Corebereich deutlich unterschätzt und im unteren Bereich mit höheren Brennstofftemperaturen überschätzt.

Das Freisetzungsverhalten des gemittelten Brennelements entspricht nicht dem Mittelwert der Freisetzungsraten der verschiedenen Brennelemente. Hierdurch ergeben sich deutliche Unterschiede bei den Ergebnissen zwischen FRESCO-I und STACY.

Eine Gegenüberstellung der zeitlichen Spaltproduktfreisetzungsraten für einzelne Bereiche im Core ist nicht möglich, da hierfür notwendige detailliertere Rechenergebnisse in [SIE1988a] nicht dargestellt sind.

4.3 Spaltproduktfreisetzung bei Auslegungsvariationen des HTR-Modul

In den bisher gezeigten Rechnungen wurde der HTR-Modul als Referenzanlage betrachtet. Die Anlage wird auch international als Referenzanlage wahrgenommen, da sich einige Konzeptanlagen, wie z. B. der chinesische HTR-PM [ZAH2009], stark an der Auslegung des HTR-Modul orientieren. Je nach Zielsetzung wird allerdings bei einigen Auslegungsdaten von der Referenzanlage abgewichen und das Reaktorkonzept an neue Ziele angepasst. Auslegungsdaten des Referenzkonzepts, die typischerweise variiert werden, sind der Zielabbrand und die nominelle Durchlaufzahl. So wird in [TEU1992] eine Variation des HTR-Modul mit gleicher Einheitsleistung aber reduzierter nominellen Durchlaufzahl (10-fach) diskutiert. Im Rahmen dieser Arbeit wird der Einfluss durch die Variation der Durchlaufzahl und des Zielabbrands auf die Spaltproduktfreisetzung sowohl unter Normalbetriebs- als auch Störfallbedingungen untersucht. Auf eine Variation der Nennleistung wird hier verzichtet, weil dies mit größeren Änderungen der Referenzanlage verbunden wäre.

4.3.1 Variation der nominellen Durchlaufzahl

Das Ziel einer möglichst gleichmäßigen Brennelementtemperaturverteilung im Core wird durch eine gleichmäßige Leistungsverteilung angestrebt. Eine weitere Homogenisierung des Cores bzw. der Leistungsverteilung im Core kann u. a. erreicht werden, indem die nominelle Durchlaufzahl erhöht wird. Bedingt durch den geringeren Abbrand pro Durchlauf hat dies gleichzeitig eine schmalere Verteilung des erreichten Endabbrandes der endgültig entladenen Brennelemente zur Folge. Auf der anderen Seite sind der Erhöhung auch Grenzen gesetzt. Die zur Verfügung stehende Messdauer zur Bestimmung des aktuellen Abbrandes nimmt bei vorgegebenem apparativen Aufwand ab, die erforderliche Messdauer zur zuverlässigen Erfassung des Abbrandes kann allerdings nicht unterschritten werden, ohne eine ausreichende Messgenauigkeit zu gewährleisten [GER1993]. Eine weitere Anhebung der Anzahl der Durchläufe wäre demnach nur mit einer Erweiterung der Beschickungsanlage möglich. Des Weiteren hat die Durchlaufzahl einen Einfluss auf die Entstehungsrate von Graphitstaub. Die Entstehung eines signifikanten Anteils des Staubes im Kugelhaufen-HTR wird mit dem Abrieb, der mit dem Brennelement-Umwälzgeschehen verknüpft ist, in Verbindung gebracht [SIE1988a].

Bei vorgegebener Geometrie, mittlerer Leistungsdichte und Schwermetallbeladung kann der gewünschte Zielabbrand bei verschiedenen Durchlaufzahlen realisiert werden (siehe Anhang 23). Durch eine Änderung der mittleren Verweilzeit und der U-235-Anreicherung der Kugeln im Reaktor kann sowohl ein k_{eff} von 1 als auch der vorgegebene Zielabbrand, ausgehend von dem Referenzkonzept, erreicht werden. Bei einer Änderung der nominellen Durchlaufzahl ändert sich die Anzahl der Abbrandzustände, die erfasst werden müssen und somit auch die Anzahl Batches, die eine Region im Kugelhaufen fasst. Das Brennstoffumsetzschema definiert für jede Batch, von welcher Region zu welcher Region eine Batch am Ende eines Zeitschritts umgesetzt werden soll. Dieses

Schema, definiert in der VSOP-Eingabedatei, muss somit an die gewünschte nominelle Durchlaufzahl angepasst werden und bildet das Ausgangsmodell.

Aufgrund von Erfahrungswerten ist eine grobe Abschätzung der erforderlichen Verweilzeit und des U-235-Anreicherungsgrades möglich. Die mittlere Leistung der Brennelemente bleibt annähernd gleich. Die Fließgeschwindigkeit der Brennelemente muss, damit die mittlere Leistung gleich bleibt, um einen Faktor entsprechend dem Verhältnis aus Durchlaufzahl beim Referenzkonzept und gewünschter Durchlaufzahl reduziert werden, wenn die Anzahl der Durchläufe verringert wird. Die präzise Bestimmung des Gleichgewichtsscores mit geänderter Durchlaufzahl erfolgt allerdings iterativ. Um eine komfortable Bestimmung des Gleichgewichtsscores mit geänderten Zielvorgaben zu ermöglichen, wurde im Rahmen dieser Arbeit die Core-Auslegung in VSOP automatisiert. Der Bestimmungsablauf des neuen Gleichgewichtsscores bei einer Änderung der Durchlaufzahl ist in Abbildung 4.32 dargestellt. Bei der umgesetzten Lösung ist es möglich, ausgehend von einer vorliegenden Core-Auslegung, bei der eine einzige Auslegungsgröße variiert wird, ein neues Gleichgewichtsscore zu bestimmen. Aufbauend auf diese neue Core-Auslegung mit VSOP kann anschließend ein MGT-3D-Modell zur detaillierteren Betrachtung von Störfallszenarien erstellt werden.

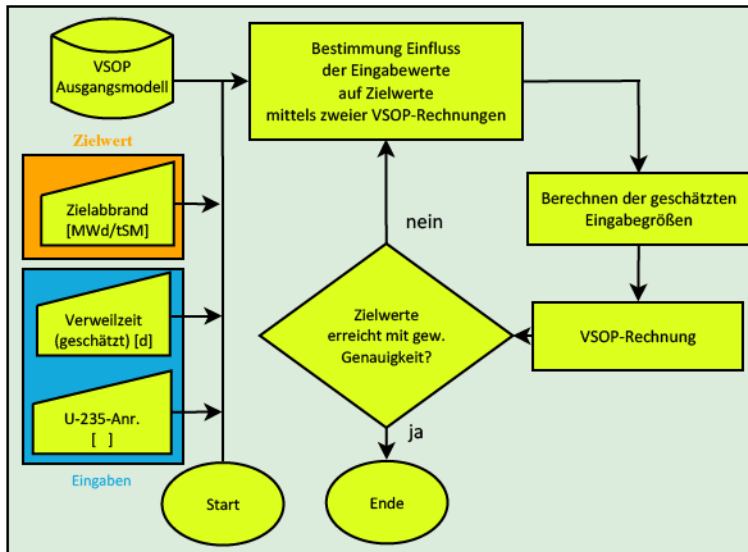


Abbildung 4.32: Ablaufdiagramm der automatisierten Bestimmung der benötigten U-235-Anreicherung und mittleren Verweilzeit der Brennelemente im Core zum Erreichen einer bestimmten nominellen Durchlaufzahl der Brennelemente

Zuerst wird eine VSOP-Rechnung mit der geschätzten U-235-Anreicherung (a_{U-235}) und mittleren Verweilzeit (t_{wv}) des Brennstoffs im Core durchgeführt. Diese Größen, die durch den Anwender vorgegeben werden, können mittels Dreisatz bestimmt werden bzw. geschätzt werden. Die Anzahl der benötigten Iterationsschritte ist von der Güte der geschätzten Eingabegrößen abhängig.

In diesem Beispiel wird nur die mittlere nominelle Durchlaufzahl der Brennelemente variiert, während der Zielabbrand des Referenzkonzeptes, im Falle des HTR-Modul 80.000 MWd/t_{SM}, unverändert bleibt. Anschließend werden zwei weitere VSOP-Rechnungen gestartet, wobei jeweils eine der zu variiierenden Eingabegrößen geringfügig geändert wird. Mit den Ergebnissen kann der

Gradient der beiden Eingabegrößen bestimmt werden. Das Gleichungssystem ist nicht vollständig linear, aber in erster Näherung trifft diese Annahme sehr gut zu (siehe Abbildung 4.33). Unter dieser Annahme, dass sich die Verhältnisse um das Modell mit den geschätzten Eingabegrößen linearisieren lassen, kann folgendes Gleichungssystem aufgestellt werden:

$$k_{\text{eff,Soll}} = k_{\text{eff}}(t_{\text{VW},0}, a_{\text{U-235},0}) + \left. \frac{\partial k_{\text{eff}}}{\partial t_{\text{VW}}} \right|_0 \cdot \Delta t_{\text{VW}} + \left. \frac{\partial k_{\text{eff}}}{\partial a_{\text{U-235}}} \right|_0 \cdot \Delta a_{\text{U-235}}$$

$$A_{\text{BE,Soll}} = A_{\text{BE}}(t_{\text{VW},0}, a_{\text{U-235},0}) + \left. \frac{\partial A_{\text{BE}}}{\partial t_{\text{VW}}} \right|_0 \cdot \Delta t_{\text{VW}} + \left. \frac{\partial A_{\text{BE}}}{\partial a_{\text{U-235}}} \right|_0 \cdot \Delta a_{\text{U-235}}$$
4.4

mit: t_{VW} - mittlere Verweilzeit [VLT]
 $a_{\text{U-235}}$ - Urananreicherung [gew.-] A_{BE} - Abbrand [MWd/t_{SM}]

Mit Hilfe der Cramerschen Regel können die gesuchten Größen Δt_{VW} und $\Delta a_{\text{U-235}}$ bestimmt werden. Die benötigte U-235-Anreicherung und mittlere Verweilzeit lassen sich somit gemäß Gleichung 4.5 ermitteln gemäß:

$$t_{\text{VW,Soll}} = t_{\text{VW},0} + \Delta t_{\text{VW}}$$

$$a_{\text{U-235,Soll}} = a_{\text{U-235},0} + \Delta a_{\text{U-235}}$$
4.5

Je nach Güte der geschätzten Eingabegrößen sind die benötigten Korrekturen $\Delta a_{\text{U-235}}$ und Δt_{VW} größer oder kleiner. Falls die benötigten Korrekturen zu groß sind, wird die Annahme des linearen Verhaltens nicht vollständig eingehalten und die Zielwerte werden nicht nach dem ersten Durchlauf getroffen. In diesem Fall wird der Vorgang mit den berechneten Daten anstelle der geschätzten Daten als Ausgangspunkt der Linearisierung wiederholt. Aufgrund der Form des Gleichungssystems wird die Lösung spätestens nach wenigen Iterationsschritten erreicht (siehe Abbildung 4.33).

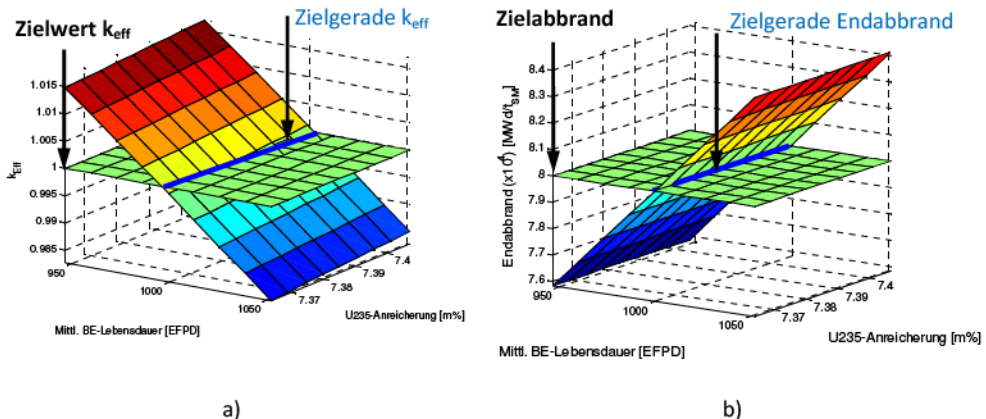


Abbildung 4.33: HTR-Modul (10 anstelle von 15 Durchläufen eines Brennelements durch das Core)
 EFPD = Equivalent Full Power Days

- k_{eff} in Abhängigkeit von der mittleren Verweilzeit des Brennstoffs im Core und der U-235-Anreicherung
- Zielabbrand in Abhängigkeit von der mittleren Verweilzeit des Brennstoffs im Core und der U-235-Anreicherung

Ausgehend von dem Referenzkonzept mit 15 Durchläufen wurde die Durchlaufzahl sukzessive reduziert auf fünf Durchläufe. Eine weitere Verringerung der Durchlaufzahl ist nicht sinnvoll, da dann die üblichen Vorteile einer MEDUL-Beschickung, wie eine gleichmäßigere Leistungsverteilung im Core und damit geringere Brennstofftemperaturen, nicht mehr zum Tragen kommen. Die Gleichgewichtsscores wurden auf Basis des in Abschnitt 4.1 dargestellten VSOP-Modells M3 (Modell mit präziser Beschreibung des Kugelfließens) bestimmt. Obwohl die Gesamtleistung der Anlage bei den verschiedenen Core-Auslegungen identisch ist, ist die Leistungsverteilung je nach Durchlaufzahl unterschiedlich. Abbildung 4.34 zeigt die mit VSOP berechnete Leistungsdichte im Core entlang der Mittelachse während des Normalbetriebs für drei unterschiedliche Durchlaufzahlen. Bei einer geringeren nominellen Durchlaufzahl verschiebt sich das Maximum der Leistungsdichte nach oben, wodurch auch die Brennstofftemperaturen beeinflusst werden. Bei einer Erhöhung der nominellen Durchlaufzahl findet eine weitere Homogenisierung des Brennstoffs statt, wodurch auch die Leistungsverteilung homogener über das Corevolumen verteilt wird.

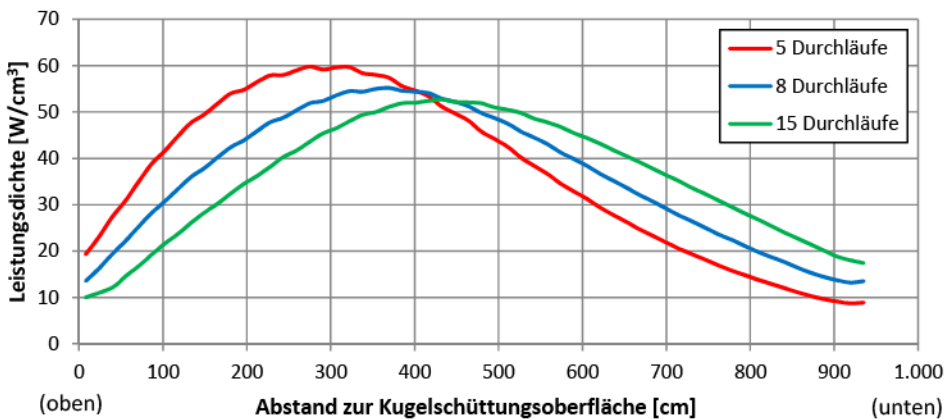


Abbildung 4.34: Leistungsdichte entlang der Mittelachse für 5, 8 und 15 Durchläufe im HTR-Modul

Die Änderung wirkt sich nicht nur auf den bestimmungsgemäßen Anlagenbetrieb aus, sondern auch auf die Temperaturverhältnisse während der Kernaufheizphase im Druckentlastungsstörfall. Abbildung 4.35 zeigt den mit MGT-3D ermittelten zeitlichen Verlauf der maximalen Brennelementtemperatur sowohl für Best-Estimate-Annahmen als auch für einen Rechenfall mit einem 10-prozentigen Sicherheitszuschlag bei der Nachzerfallsleistung. Ausgehend von der Referenzanlage erhöhen sich die zeitlichen Brennelementtemperaturen mit jeder Verringerung der Durchlaufzahl. Bei einer Verringerung der nominellen Durchlaufzahl von 15 auf 6 erhöht sich die maximale Brennelementtemperatur in dem betrachteten Störfall um ca. 80°C.

In Abbildung 4.36 werden die Maximaltemperaturen im Druckentlastungsstörfall in Abhängigkeit von der nominellen Durchlaufzahl aus [BER2003] mit eigenen MGT-3D-Rechnungen verglichen. Bei der Durchlaufzahl beim Referenzfall beträgt die Temperaturdifferenz zwischen dem Interatom-Programmpaket ZIRKUS und MGT-3D bei sowohl 100 als auch 110 der Nachzerfallsleistung ca. 25°C. Bei einer Verringerung der Durchlaufzahl nimmt die Temperaturdifferenz auf ca. 12°C ab.

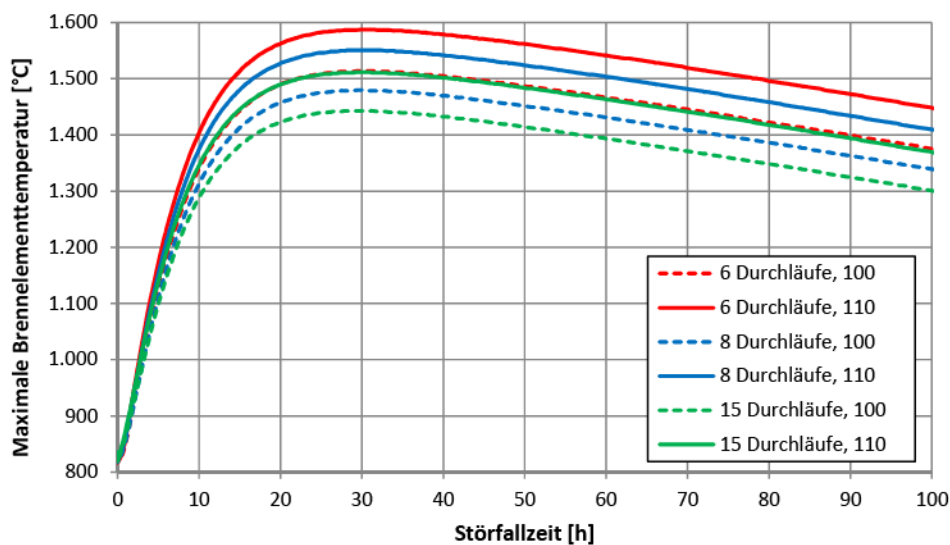


Abbildung 4.35: Mit MGT-3D ermittelte Verlauf der maximalen Brennelementtemperatur in der Kernaufheizphase des HTR-Modul bei 100 und 110 Nachzerfallsleistung und einer Variation der nominellen Durchlaufzahl

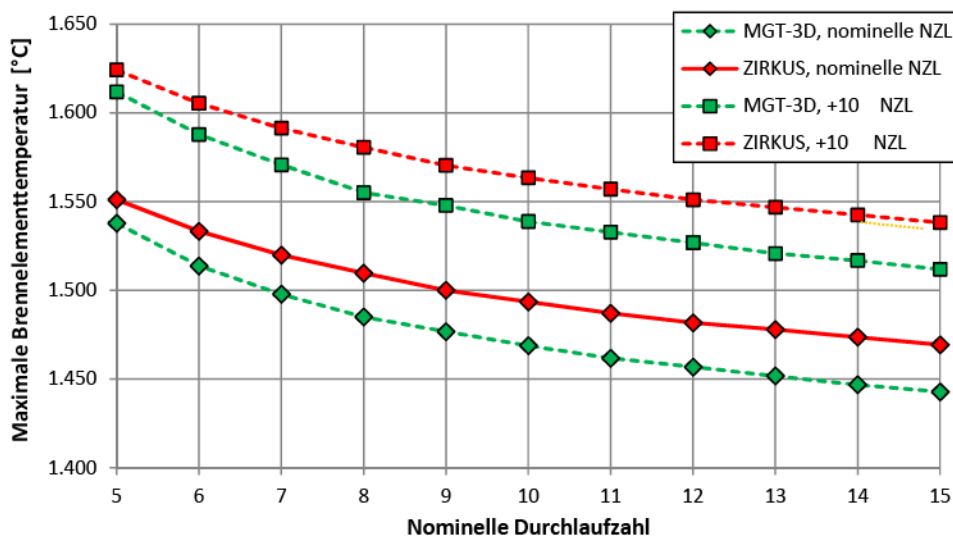


Abbildung 4.36: Maximaltemperatur in der Kernaufheizphase des HTR-Modul in Abhängigkeit von der nominellen Durchlaufzahl bei 100 und 110 der NZL. Gegenüberstellung der ZIRKUS-Rechnungen [BER2003] und eigener MGT-3D-Rechnungen (NZL = Nachzerfallsleistung, WL = Wärmeleitfähigkeit, WK = Wärmekapazität)

In [BER2003] sind die Eingabegrößen u. a. für die verwendeten Stoffwerte sowie detaillierte Annahmen bzgl. des Störfallszenarios nicht angegeben. Deshalb ist ein tiefer gehender Vergleich zwischen den mit unterschiedlichen Programmen ermittelten Temperaturverläufen hier nicht möglich.

Basierend auf den Core-Auslegungen kann die Auswirkung einer Änderung der nominellen Durchlaufzahl auf die Spaltproduktfreisetzung sowohl unter Normalbetriebs- als auch Störfallbedingungen quantifiziert werden. Bei den Auslegungsversionen werden nur die Nuklide Cs-137, Sr-90 und I-131 betrachtet. Das Nuklid Ag-110m wird in diesem Abschnitt nicht weiter betrachtet. STACY-Simulationen haben gezeigt, dass der Einfluss auf die mittleren Freisetzungsraten von Cs-137, Sr-90 und I-131 bei bestimmungsgemäßem Betrieb gering ist. Sie beträgt nur wenige Prozent ($< 4\%$).

Die Auswirkung auf das Freisetzungsverhalten unter Störfallbedingungen ist dagegen deutlich ausgeprägter. Die Cs-137-Freisetzungsrates in der Kernaufheizphase ist für verschiedene Durchlaufzahlen in Abbildung 4.37 dargestellt. Dabei wurden bei der Berechnung Auslegungswerte eingesetzt. Bei einer Verringerung der Durchlaufzahl von 15 auf 5 steigt die maximale Cs-137-Freisetzungsrates um etwa den Faktor 3. Dabei tritt gleichzeitig eine zeitliche Verschiebung des Maximums auf. Das Verhältnis ist allerdings nicht über den gesamten Zeitraum so groß, wodurch die Änderung der kumulativen Freisetzung geringer ausfällt.

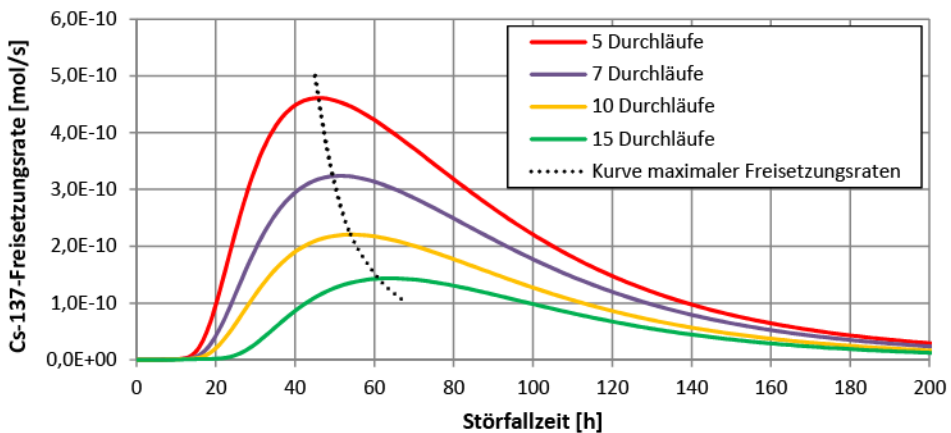


Abbildung 4.37: Einfluss der nominellen Durchlaufzahl auf den zeitlichen Verlauf der Cs-137-Freisetzungsrates im Störfall (Ausgangskonzept, HTR-Modul)

Die in der Kernaufheizphase kumulativ nach 200 Stunden freigesetzte Cs-137- und I-131-Menge ist in Abbildung 4.38 für verschiedene Durchlaufzahlen dargestellt. Je nach Berechnungsverfahren des Partikelbruchanteils steigt die Cs-137-Freisetzung um den Faktor zwei (PANAMA) oder drei (Trompetenkurve) bei einer Verringerung der Durchlaufzahl von 15 auf 5. Die freigesetzte I-131-Menge nimmt mit abnehmender Durchlaufzahl zuerst nur geringfügig zu, wohingegen die Menge bei fünf Durchläufen bei beiden Berechnungsmethoden um etwa 50 % über der freigesetzten Menge im Ausgangskonzept liegt.

Abbildung 4.39 zeigt die freigesetzte Sr-90-Menge in Abhängigkeit von der Durchlaufzahl. Bei einer kleinen Änderung der Durchlaufzahl ist die prozentuale Änderung der freigesetzten Menge vergleichbar mit der Änderung bei Cs-137 und I-131. Bei einer größeren Verringerung der Durchlaufzahl steigt die freigesetzte Menge, bedingt durch die erhöhten Temperaturen, deutlich an. Wie die Abbildung 4.37 zeigt, wirken sich die unterschiedlichen Ansätze zur Bestimmung des Partikelbruchanteils sich nur unwesentlich auf die kumulative Freisetzung aus.

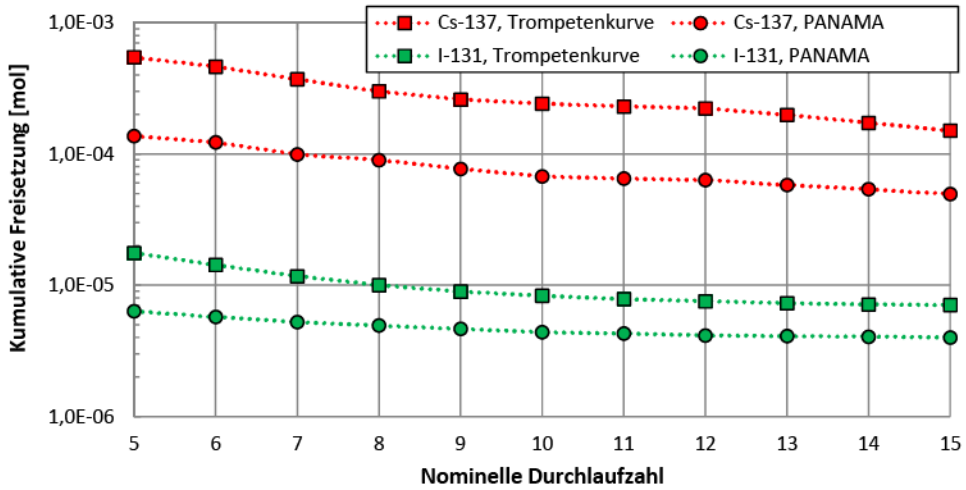


Abbildung 4.38: Freigesetzte Cs-137 und I-131-Menge in den ersten 200 Stunden nach der Druckentlastung in Abhängigkeit von der nominellen Durchlaufzahl der Brennelemente

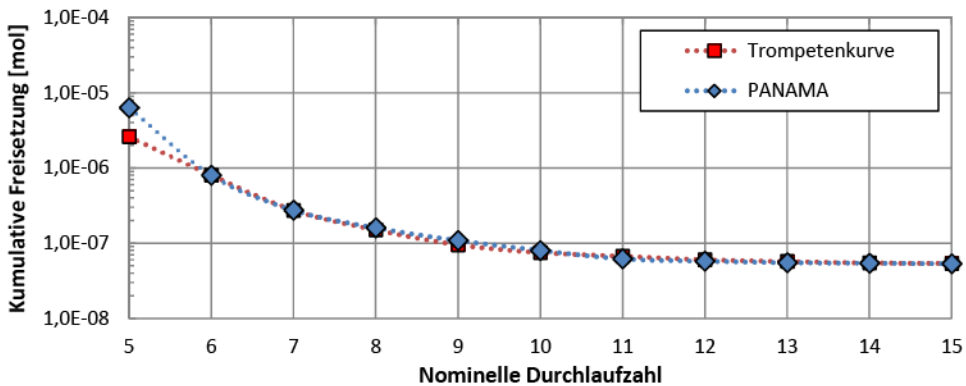


Abbildung 4.39: Kumulativ freigesetzte Sr-90-Menge in den ersten 200 Stunden nach der Druckentlastung in Abhängigkeit von der nominellen Durchlaufzahl der Brennelemente

4.3.2 Erhöhung des Zielabbrands

Der Zielabbrand ist eine der wichtigsten Größen bei der Core-Auslegung im Hinblick auf die Wirtschaftlichkeit der Anlage. Ohne das an dieser Stelle zu quantifizieren, kann generell festgehalten werden, dass die Kosten durch die Erhöhung des Zielabbrands bedingte höhere Anreicherung einerseits ansteigen, die Produktionskosten der eigentlichen Brennelemente aus dem Schwermetall andererseits jedoch annähernd gleich sind. Demnach können die Brennstoffkosten durch eine Anhebung des Zielabbrandes gesenkt werden. Auch bei *LWR* werden deshalb höhere Zielabbrände angestrebt. Bedingt durch das erhöhte Spaltgasinventar und die höhere Neutronenfluenz nimmt der Druck im Partikel zu und die Zugspannung der SiC-Schicht ab. Hinzu kommt, dass die Verweilzeit im Reaktor zunimmt. Insgesamt ist somit mit einem erhöhten Partikeldefektanteil innerhalb eines

Kugelbrennelements am Ende ihrer Lebensdauer und damit einem insgesamt höheren mittleren Partikeldefektanteil im Core zu rechnen.

Die Auswirkung einer Änderung des Zielabbrands soll an dieser Stelle quantifiziert werden. Hierzu wird der Zielabbrand von 80.000 auf 90.000 und 100.000 MWd/t_{SM} angehoben. Bei vorgegebener Kerngeometrie, Schwermetallbeladung und Anzahl der Durchläufe bis zum Zielabbrand kann dieser lediglich durch eine Änderung der U-235-Anreicherung erreicht werden. Gleichzeitig muss die mittlere Verweilzeit im Core an die neuen Bedingungen angepasst werden. Die Gleichgewichtscores werden nach dem gleichen iterativen Verfahren bestimmt, das bei der Änderung der Durchlaufzahl eingesetzt wird (siehe Abschnitt 4.3.1). Dabei sind die in Tabelle 4.8 dargestellten Werte für die mittlere Lebensdauer eines Brennelements und die U-235-Anreicherung ermittelt worden.

Mit dem in Abschnitt 3.4.3 bestimmten Nachteilkfaktor von 0,65, mit dem die Selbstabschirmung berücksichtigt wird, wird auch der erhöhte Zielabbrand im Durchschnitt getroffen. Eine separate iterative Bestimmung des Faktors ist demnach nicht notwendig.

Tabelle 4.8: Mittlerer Abbrand und U-235-Anreicherung für zwei Gleichgewichtskerne mit erhöhtem Zielabbrand gegenüber des Referenzfalls

Abbrand	[MWd/t _{SM}]	80.000 (Referenz)	90.000	100.000
Mittlere Verweilzeit	[VLT]	972	1.088	1.208
U-235-Anreicherung	[gew.-%]	7,4	8,0	8,7

Die Brennelementtemperaturen in der Kernaufheizphase bleiben weitestgehend unbeeinflusst, lediglich das Inventar der langlebigen Nuklide und der Partikeldefektanteil steigen bei Anhebung des Zielabbrands an (siehe Tabelle 4.9). Der Partikeldefektanteil nach 200 Stunden steigt um 10 bzw. 18 bei einem Zielabbrand von 90.000 bzw. 100.000 MWd/t_{SM} gegenüber 80.000 MWd/t_{SM}.

Tabelle 4.9: Inventar eines Kugelbrennelements beim Zielabbrand

Abbrand	[MWd/t _{SM}]	80.000	90.000	100.000
Cs-137	[mol]	$1,5 \cdot 10^{-4}$	$1,7 \cdot 10^{-4}$	$1,9 \cdot 10^{-4}$
I-131	[mol]	$6,1 \cdot 10^{-7}$	$5,7 \cdot 10^{-7}$	$5,3 \cdot 10^{-7}$

Das Endinventar langlebiger Nuklide ändert sich bei einer Änderung des Zielabbrands in erster Näherung proportional zur Anhebung des Zielabbrands. Bei den ersten Durchläufen ist das Verhältnis der Inventare bei Tracer-Brennelementen mit verschiedenen Zielabbränden in etwa zwei Mal so groß wie das Verhältnis am Ende. Im Laufe der Lebensdauer nimmt das vorher genannte Verhältnis ab. Das bedeutet, dass der Inventaraufbau langlebiger Nuklide bei einer Erhöhung des Zielabbrands bei den ersten Durchläufen relativ langsamer stattfindet, als der Inventaraufbau bei der Referenzanlage. Dies lässt sich auf die Erhöhung der U-235-Anreicherung zurückführen.

Die Verhältnisse beim kurzlebigen I-131 sind anders. Im ersten Durchlauf ist das I-131-Inventar des Brennelements mit erhöhtem Zielabbrand bei gleichem Weg durch das Core deutlich höher. Mit zunehmender Durchlaufzahl nimmt das Verhältnis der Inventare ab. Im zweiten Durchlauf ist das Inventar des Brennelements mit erhöhtem Zielabbrand zum größten Teil größer. Lediglich im unteren Corebereich ist das Inventar geringfügig kleiner. Mit zunehmender Durchlaufzahl nimmt das

Zeitintervall, in dem das Inventar größer ist, ab, so dass das I-131-Inventar des Brennelements mit erhöhtem Zielabbrand beim letzten Durchlauf größtenteils geringer ausfällt. Insgesamt ist das I-131-Inventar im Core in etwa 3 % höher als bei einem Zielabbrand von 100.000 MWd/t_{SM} im Vergleich zum Referenzfall. Somit hat die Änderung des Zielabbrandes insgesamt eine geringe Auswirkung auf die I-131-Freisetzung des Gleichgewichtscores. Bei einem Zielabbrand von 90.000 bzw. 100.000 MWd/t_{SM} ist die kumulierte Freisetzung 8 % bzw. 15 % höher im Vergleich zum Referenzfall.

Durch eine Überlagerung des erhöhten Partikeldefektanteils mit dem erhöhten Spaltproduktinventar nehmen die in den ersten 200 Stunden nach der Druckentlastung freigesetzten Cs-137 und Sr-90-Mengen deutlich zu (siehe Abbildung 4.40). Bei einer Anhebung des Zielabbrandes auf 100.000 MWd/t_{SM} steigt die freigesetzte Cs-137-Menge um 100 % und die Sr-90-Menge um 60 %.

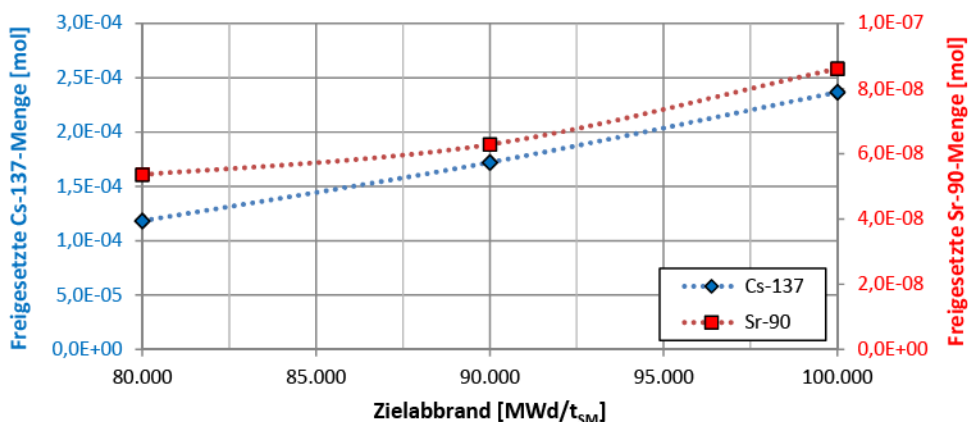


Abbildung 4.40: Kumulativ freigesetzte Cs-137 und Sr-90-Menge in den ersten 200 Stunden nach der Druckentlastung für verschiedene Zielabbrände im HTR-Modul

Die I-131-Freisetzung in der Kernaufheizphase steigt deutlich weniger an im Vergleich zu Cs-137 und Sr-90. Bedingt durch die Tatsache, dass das Inventar nur sehr gering zunimmt, steigt die Spaltproduktfreisetzung vornehmlich infolge des erhöhten Partikeldefektanteils. Bei einer Anhebung des Zielabbrandes auf 90.000 MWd/t_{SM} nimmt die freigesetzte I-131-Menge um 5 % zu, und bei einem Zielabbrand von 100.000 MWd/t_{SM} um 13 % zu.

5 HTTR-Anlagenrechnung

Der japanische High-Temperature Engineering Test Reactor (*HTTR*) ist ein Hochtemperaturreaktor mit prismatischen Brennelementen, welcher in Abschnitt 1.2 näher vorgestellt wurde. Die in Abschnitt 1.5 dargestellte Erweiterung von STACY ermöglicht eine genauere Modellierung der Geometrie einzelner Compacts. Zusätzlich zu der räumlich aufgelösten Freisetzungsrechnung bei Kugelhaufenreaktoren erlaubt STACY durch die vorher genannte Erweiterung und die Kopplung mit dem Monte-Carlo Transport- und Abbrandcode Serpent [LEP2007] diese Freisetzungsrechnung auch für HTR mit prismatischen Brennelementen durchzuführen (siehe Abschnitt 3.8). In diesem Kapitel wird am Beispiel des HTTR die Berechnungskette angewandt. Der bei der Konzipierung des HTTR angedachte Betriebsplan („Standard Operation Plan“), bei dem die Anlage über 660 Tage unter Volllast betrieben werden soll, wird untersucht, um einen Vergleich mit einer publizierten Studie [VER2001] zu ermöglichen. Dazu werden die Neutronik- und Abbrandrechnung mit Serpent und die Spaltproduktfreisetzungsrechnung mit STACY vorgestellt. Abschließend werden die mit STACY berechneten Freisetzungsverläufe mit der vorher erwähnten Studie verglichen.

5.1 Neutronentransport- und Abbrandrechnung mit Serpent

Zur Bestimmung der Neutronenflussverteilung als auch der Inventare während des Betriebs wird im ersten Schritt ein Serpent-Modell des HTTR erstellt. Für die Modellierung des Brennstoffs inklusive abbrennbarer Gifte in Serpent wurden Angaben aus [NN2003] und [NOJ1998] herangezogen. Das Erstcore des HTTR besteht aus fünf Brennelementschichten, die oben und unten durch jeweils zwei zusätzliche Schichten mit Reflektorböcken abgeschlossen werden (siehe Abbildung 5.1).

Radial werden die prismatischen Böcke in vier Zonen, Z1 bis Z4, mit unterschiedlicher U-235-Anfangsanreicherung und unterschiedlichem Borgehalt eingeteilt (siehe Abbildung 5.1a). Die Böcke der Brennstoffzonen Z1 und Z2 verfügen über 33 Stäbe pro Block. Die Böcke der anderen beiden Zonen verfügen über jeweils 31 Stäbe, wobei die in Abbildung 5.1b) mit einem „X“ gekennzeichneten Bohrungen bei diesen Böcken nicht durch einen Brennstab besetzt sind. Des Weiteren wird die Anfangsanreicherung auch noch über die Brennelementschichten L1 bis L5 variiert. Insgesamt kommen 10 verschiedene U-235-Anreicherungsgrade im HTTR-Core zum Einsatz (siehe Tabelle 5.1).

Dieser Anreicherungsgrad ist im geometrischen Zentrum des Cores am geringsten und nimmt sowohl nach außen als auch nach oben bzw. unten hin zu. Hierdurch werden Temperaturspitzen im Inneren des Cores reduziert und das Temperaturprofil über dem Reaktorcore vergleichmäßig. Die Anreicherung aller Compacts innerhalb eines Blockes ist gleich. Des Weiteren verfügt jeder Block an drei von sechs Ecken über kleinere Bohrungen zur Aufnahme von Sticks mit abbrennbaren Giften (siehe Abbildung 5.1b). Dabei sind zwei von drei Positionen besetzt. Im Core kommen zwei unterschiedlichen Absorbersticks zum Einsatz (siehe Tabelle 5.1). Die Modellierung der Brennstoffböcke ist in Anhang 24 dargestellt.

Im Inneren eines aus Brennelementen bestehenden Hexagons des Cores sind Böcke zur Führung von Regel- und Abschaltstäben vorgesehen, um Regel- und Abschaltreaktivität in das Core einzubringen (siehe Abbildung 5.1a). Dabei sind auch hier zwei von drei Positionen besetzt.

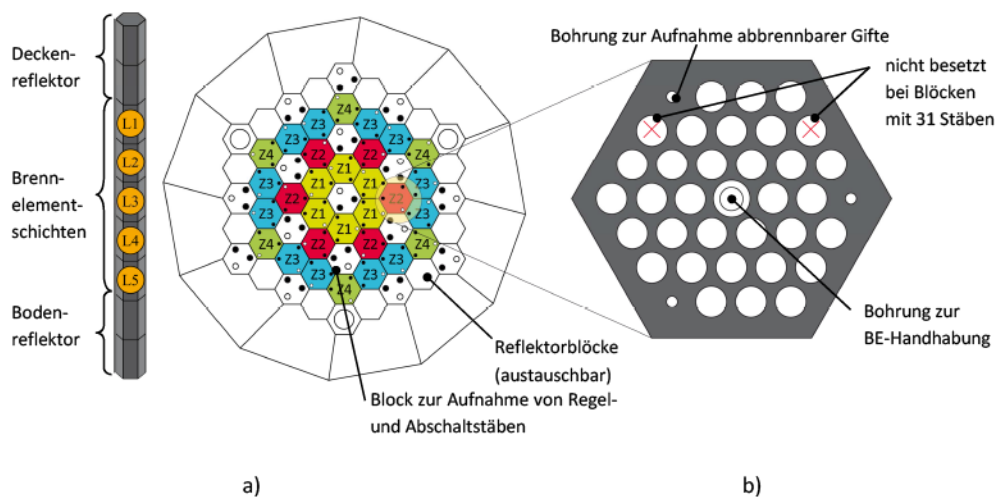


Abbildung 5.1: a) HTTR-Brennstoffbelegung im Core: Zonen Z1 und Z2 mit 33 Stäben je Block, Zonen Z3 und Z4 mit 31 Stäben je Block (eigene Darstellung)
b) Detaildarstellung eines prismatischen Blockes (eigene Darstellung)

Tabelle 5.1: Räumliche Verteilung von U-235-Anreicherung und Borgehalt in den Absorbersticks im Core des HTTR [gew.-], [SAI1991]

Brennelement-schicht	Zone Z1	Zone Z2	Zone Z3	Zone Z4
L1	6,7 / 2,0	7,9 / 2,0	9,4 / 2,0	9,9 / 2,0
L2	5,2 / 2,5	6,3 / 2,5	7,2 / 2,5	7,9 / 2,5
L3	4,3 / 2,5	5,2 / 2,5	5,9 / 2,5	6,3 / 2,5
L4	3,4 / 2,5	3,9 / 2,0	4,3 / 2,0	4,8 / 2,0
L5	3,4 / 2,0	3,9 / 2,0	4,3 / 2,0	4,8 / 2,0

Auch zur Modellierung der Regelstäbe und Regelstabpositionen wurden die Angaben aus [NOJ1998] genutzt. Die einzelnen Regelstabpositionen sind der Abbildung 5.2 zu entnehmen.

In Abbildung 5.3 sind die mit Serpent ermittelten mittleren Abbrände für jede Brennelementschicht und Zone den durch Japan Atomic Energy Agency (JAEA) berechneten Daten gegenübergestellt. Zu sehen ist, dass ein Vernachlässigen der Steuerstäbe dazu führt, dass der Abbrand im oberen Corebereich deutlich überschätzt wird. Die Angaben aus [NOJ1998] beschreiben die Stabpositionen bei der Erstkritikalität und wurden in der Serpent-Modellierung genutzt. Beim Serpent-Modell wurde die Stabbewegung über die Zeit nicht im Detail modelliert, da sie für die Berechnung der Spaltproduktfreisetzung nicht von Bedeutung ist. In der Realität müssen die Stäbe aufgrund der mit zunehmendem Abbrand nachlassender Reaktivität zunehmend gezogen werden. Im Serpent-Modell stehen die Stäbe nach einer gewissen Zeit somit zu tief im Core, wodurch der Abbrand im oberen Bereich leicht unterschätzt und in der vierten und fünften Brennelementschicht überschätzt wird. Die Unterschiede zwischen den veröffentlichten Daten und die mit Serpent berechneten Daten sind

jedoch für die im Rahmen dieser Arbeit angestrebte Spaltproduktfreisetzungsrechnung sehr akzeptabel.

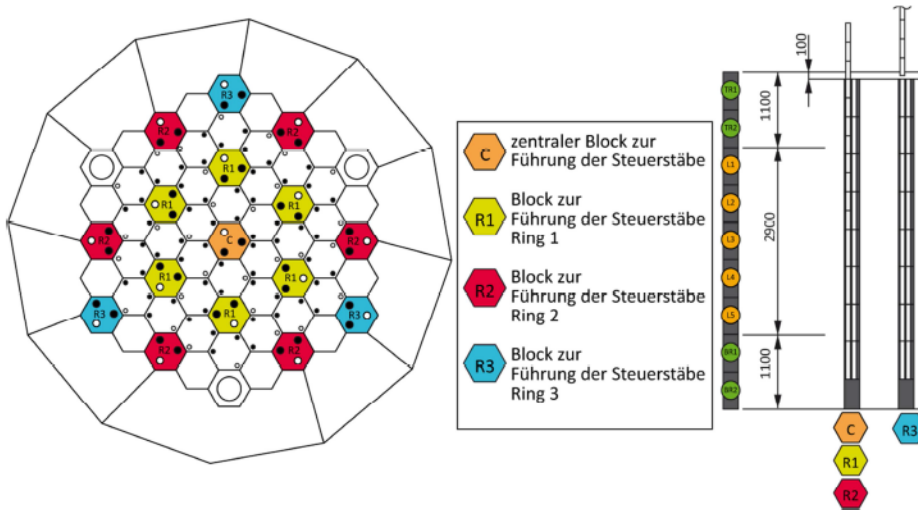


Abbildung 5.2: Regelstabpositionen im anfänglichen Serpent-Modell für den HTTR [NOJ1998] (eigene Darstellung)

Ausgehend von den in Abbildung 5.2 gezeigten Positionen wurde durch ein iteratives Anpassen der Stabpositionen die mit Serpent bestimmte räumliche Verteilung des Abbrandes an die JAEA-Ergebnisse angeglichen.

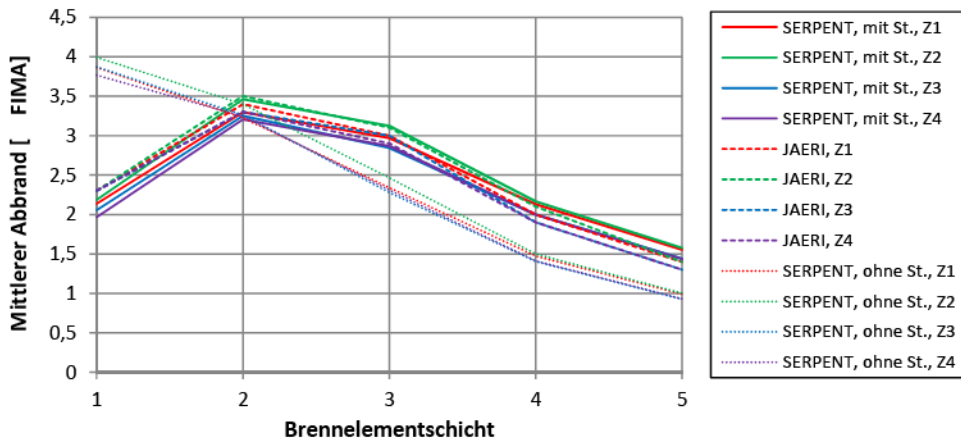


Abbildung 5.3: Vergleich der Serpent-Ergebnisse (mit und ohne Modellierung der Steuerstäbe) mit JAEA-Daten [NOJ1998, VER2001] (Brennelementschichten sind von oben nach unten durchnummeriert)

Die Verteilung des Endabbrandes und des Cs-137-Inventars nach 660 VLT in Brennelementschicht L3 ist in Abbildung 5.4 dargestellt.

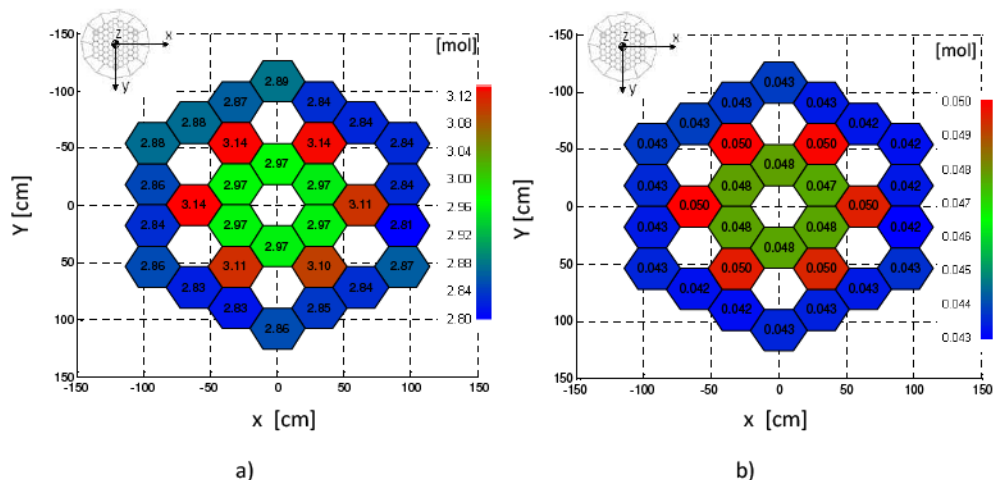


Abbildung 5.4: Räumliche Verteilung der Brennelemente in Brennelementschicht L3 nach einer Betriebszeit des HTTR von 660 Volllasttagen (Werte gelten jeweils für den gesamten Brennstoffblock)

a) Verteilung des lokalen Abbrands [FIMA]

b) Verteilung des Cs-137-Inventars [mol]

Aufgrund der Statistik bzw. der beschränkten Anzahl simulierter Neutronenhistorien wird die Symmetrie des Cores bei den Ergebnissen nicht exakt wiedergegeben. Die Genauigkeit der Ergebnisse als Eingangsdatensatz für eine Spaltproduktfreisetzungsrechnung ist aber mehr als ausreichend. Die Temperaturerhöhung in der Hochtemperaturphase beeinflusst die makroskopischen Querschnitte nur sehr begrenzt, so dass die zeitliche Änderung des Abbrandes und Inventars nur unwesentlich beeinflusst werden. Das mittlere Cs-137-Inventar eines Brennstoffblocks liegt am Ende des betrachteten Zeitraums bei 0,0366 mol. Der zeitliche Verlauf der Cs-137, Sr-90 und I-131-Inventare im gesamten Core ist in Abbildung 5.5 dargestellt.

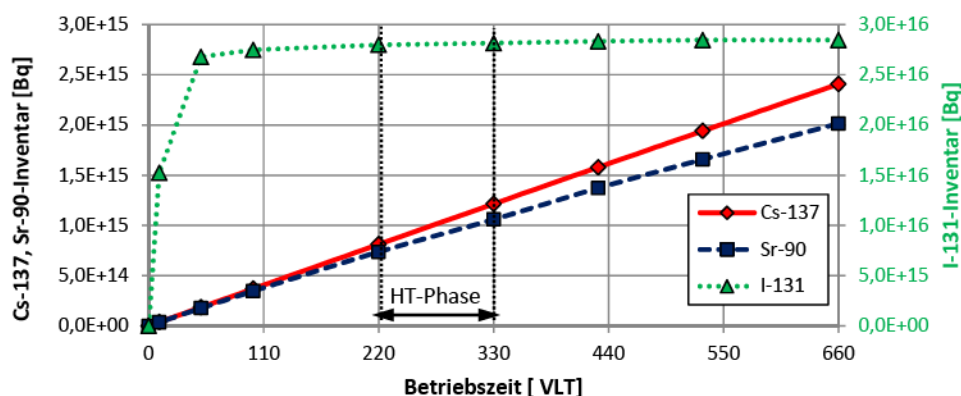


Abbildung 5.5: Cs-137, Sr-90 und I-131-Inventare im Laufe des Betriebs des HTTR gemäß „Standard-Operation Plan“

Die in der horizontalen Verteilung erkennbaren konzentrischen Kreise in Abbildung 5.4 sind bedingt durch die Core-Auslegung. Der Aufbau der Cs-137 und Sr-90-Inventare verläuft weitestgehend linear. Das I-131-Gleichgewichtsinventar wird bedingt durch die kurze Halbwertszeit bereits nach wenigen Monaten Betriebszeit erreicht. Das Inventar wird als weitere Größe neben der absoluten Freisetzungsrates zur Berechnung der relativen Spaltproduktfreisetzungsrates herangezogen.

5.2 Räumlich aufgelöste Freisetzungsrechnung

Im Rahmen dieser Arbeit wird der zeitliche Verlauf der Spaltproduktfreisetzung am Beispiel des Cs-137 simuliert. Weitere Eingangsdaten zur Berechnung, wie z. B. die räumliche Temperaturverteilung, wurden [VER2001] entnommen. Abbildung 5.6 zeigt die Temperaturverteilung in der untersten Brennelementschicht bei einer mittleren Kühlgasaustrittstemperatur von 950°C. Die maximale Temperaturdifferenz bei den nominellen Brennstofftemperaturen beträgt knapp 30°C. Die Bohrungen werden zum Teil unterschiedlich gut angeströmt. Hierdurch weichen die Kühlungsbedingungen von der idealen Verteilung ab und es können Hot-Spots entstehen [MIN2011]. Bei Berücksichtigung eines durch die JAEA abgeschätzten Temperaturzuschlags aufgrund dieser Hot-Spots ist das radiale Temperaturprofil mit einer maximalen Temperaturdifferenz von 8°C wenig stark ausgeprägt. In vertikaler Richtung ist das Temperaturprofil sehr viel stärker ausgeprägt. So ist der absolute Temperaturanstieg in der ersten Brennelementschicht bei nominellen Temperaturen 400°C und mit Hot-Spot Zuschlag fast 500°C [SAI1991]. Bei den darunter liegenden Brennelementschichten ist die Temperaturdifferenz, bei absolut höheren Brennstofftemperaturen, weniger groß.

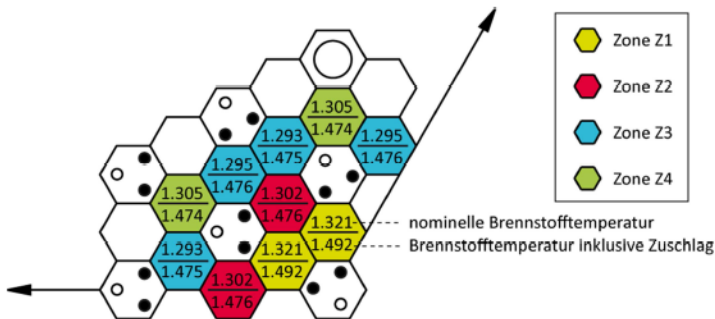


Abbildung 5.6: Temperaturverteilung in der untersten Brennelementschicht bei einer mittleren Heliumaustrittstemperatur von 950°C [SAI1991] (überarbeitet)

Ein Effekt, der beim Kugelhaufenreaktor von untergeordneter Bedeutung ist, aber bei Reaktoren mit prismatischen Brennelementen eine nennenswerte Rolle spielen kann, ist der sogenannte „Amöbenefekt“ im Partikel. Hierbei bewegt sich der Partikelkern in Richtung höherer Temperaturen. Dieses Wandern wird durch einen Nettokohlenstoffstrom von der heißeren Seite in Richtung der kälteren Seite verursacht. Das Versagen eines Partikels infolge des bei der Migration des Partikelkerns möglichen Kontakts mit der inneren PyC-Schicht wird nicht durch das PANAMA-Modell erfasst. Zur Erfassung dieses Anteils müssten die Temperaturverhältnisse im Core detaillierter berechnet werden. Für die Spaltproduktfreisetzungsrechnung wurden an dieser Stelle die durch die JAEA veröffentlichten Temperaturverläufe herangezogen. Zur Berücksichtigung von Partikelversagen werden die in [VER2001] getroffenen Annahmen zum Partikelbruchanteil übernommen.

Die der STACY-Rechnung zugrunde liegenden Daten bzgl. Partikelgeometrie, Verteilung des freien Uran und Partikeldefektanteilen sind in Tabelle 5.2 dargestellt.

Tabelle 5.2: Brennstoffgeometrie, Uranverunreinigungen in den unterschiedlichen Schichten und Partikeldefektanteile in Abhängigkeit von der Zeit [VER2001]

Eigenschaft		Einheit	Erwartungswert	Auslegungswert
Durchmesser des Partikelkerns		[μm]	600	
Schichtdicke	Puffer	[μm]	60	
	IPyC	[μm]	30	
	SiC	[μm]	30	25
	OPyC	[μm]	45	
Uranverunreinigung ⁷	Matrixgraphit	-	$2,5 \cdot 10^{-6}$	
	Puffer	-	$1,0 \cdot 10^{-6}$	
	IPyC	-	$1,0 \cdot 10^{-6}$	
	SiC	-	$1,0 \cdot 10^{-4}$	
	OPyC	-	$1,0 \cdot 10^{-6}$	
Partikelbruchanteil	herstellungsbedingt	-	$8,0 \cdot 10^{-5}$	$2,0 \cdot 10^{-3}$
	bestrahlungsbedingt	-	0	$8,0 \cdot 10^{-3}$
Verlauf der Partikeldefektanteilfunktion (Treppenfunktion)		-	$8,0 \cdot 10^{-5}$	$< 66 \text{ VLT} : 2,0 \cdot 10^{-3}$
		-		$\geq 66 \text{ VLT} : 3,6 \cdot 10^{-3}$
		-		$\geq 594 \text{ VLT} : 1,0 \cdot 10^{-3}$

In den beiden Rechnungen mit Erwartungs- bzw. Auslegungswerten werden gleiche geometrische Verhältnisse und Uranverunreinigungen angenommen, mit Ausnahme der SiC-Schicht. In der Auslegungsrechnung wurde in konservativer Weise mit einer im Durchschnitt dünneren SiC-Schicht gerechnet. Bei Erwartungswerten wird vorausgesetzt, dass bestrahlungsbedingt keine Partikel versagen und lediglich der produktionsbedingte Anteil von $8,0 \cdot 10^{-5}$ als Defektpartikel vorliegt. Bei Auslegungsdaten wird eine Treppenfunktion für den Partikelbruchanteil angenommen. Die verwendeten Diffusionskoeffizienten entsprechen den japanischen Referenzdaten und sind in Tabelle 5.3 zu finden.

Tabelle 5.3: In der STACY-Rechnung für den HTR verwendete Diffusionskoeffizienten, festgelegt durch Frequenzfaktor und Aktivierungsenergie für die Arrhenius-Gleichung, am Beispiel von Caesium [VER1993]

Material	Frequenzfaktor [m^2/s]	Aktivierungsenergie [kJ/mol]
UO ₂	$8,1 \cdot 10^{-8}$	209
PyC	$6,3 \cdot 10^{-8}$	222
SiC	$7,1 \cdot 10^{-14}$	125
Matrixgraphit	$3,6 \cdot 10^{-4}$	189

Die Diffusionskoeffizienten für Caesium in PyC und Matrixgraphit des japanischen Referenzdatensatzes stimmen mit den Empfehlungen von der International Atomic Energy Agency (IAEA) überein [IAE1997]. Die Diffusionskoeffizienten für UO₂ und SiC sind allerdings unterschiedlich. Bei UO₂ ist die

⁷ Uranverunreinigung: In der Schicht vorhandenes Uraninventar bezogen auf das Gesamtinventar

Differenz für den gesamten Temperaturbereich allerdings sehr klein. Bei SiC ist eine deutliche Differenz erst bei hohen Temperaturen, die im Normalbetrieb nicht erreicht werden, gegeben (siehe Anhang 25). Insgesamt sind die Differenzen zwischen den beiden Datensätzen mit Diffusionskoeffizienten für diese Rechnung somit vernachlässigbar.

Da die Temperaturverteilung bei prismatischen HTR in der Regel inhomogener als bei Kugelhaufenreaktoren mit deren turbulenten Strömung ist, spielt der oben erwähnte Amöbeneffekt nur bei Blockreaktoren eine nennenswerte Rolle. Beim japanischen HTTR wird davon ausgegangen, dass der Brennstoff hohen Temperaturgradienten ausgesetzt ist [VER1993]. Untersuchungen haben gezeigt, dass sogar bei den im Vergleich zu einem modularen Kugelhaufenreaktor hohen Brennstofftemperaturen bei einer Vorgabe des Zielabbrandes von nicht mehr als 33.000 MWd/t_{SM}, der Partikelkern um maximal 55 µm wandern kann. Dies ist sehr viel weniger als der Sicherheitsauslegungswert von 90 µm (Summe aus Puffer- und IPyC-Schichtdicke) [VER1993]. Im Rahmen einer JAEA-Studie wurde ebenfalls untersucht, ob beim HTTR-Brennstoff mit dem korrosiven Angriff von Palladium auf die SiC-Schicht zu rechnen ist. Messungen haben allerdings gezeigt, dass die maximale Penetrationstiefe am Ende der Lebensdauer 11 µm beträgt (< 50 der SiC-Schichtdicke) [VER1993].

Bei der STACY-Simulation werden die Partikelbruchanteile nicht nach dem PANAMA-Modell ermittelt, sondern es wird für jede Brennelementschicht die identische, von der JAEA bestimmte Bruchanteilkurve angenommen. Für jeden Raumbereich wird die gleiche Bruchanteilkurve angenommen. Diese Kurve beschreibt die Zeitabhängigkeit der Bruchanteile. Falls dieser Ansatz bei einer Simulation eines kompletten Cores angesetzt wird, versagen nur zu bestimmten Zeitpunkten größere Partikelmengen in der Rechnung mit Auslegungswerten. Durch die spontane Freisetzung des angesammelten Spaltproduktinventars aus der Pufferschicht tritt nach dem Partikelbruch eine ausgeprägte Spitze in der Freisetzungskurve auf (siehe Abbildung 5.7).

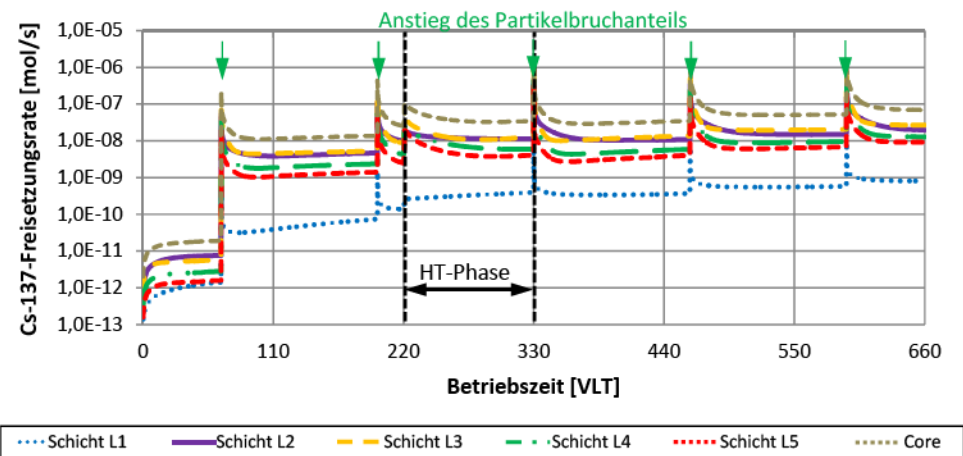


Abbildung 5.7: Cs-137-Freisetzungsraten für das gesamte HTTR-Core auf Basis einer Partikelbruchfunktion mit fünf Stufen

Da das Partikelversagen überall gleichzeitig stattfindet, überlagern sich diese Spitzen, so dass diese noch ausgeprägter ausfallen. In der Realität versagen Partikel jedoch stochastisch und nicht zu bestimmten Zeitpunkten. Der stochastische Charakter des Partikelversagens wird demnach mit dieser Methodik nicht abgebildet.

Um die Realität besser abzubilden, wurde das Eintreten von Partikelversagen durch einen Monte-Carlo-Ansatz bestimmt, wobei ausgewürfelt wird, welche Partikel im Core versagen. Bei diesem Ansatz können nur ganzzahlige Werte von Partikeln defekt sein. Das Partikelversagen tritt willkürlich auf, wobei im Mittel der vorgegebene mittlere Defektanteil eingehalten wird. Im Gegensatz dazu können Partikeldefektanteile in FRESCO-II verwendet werden, die nicht einer ganzen Zahl entsprechen. Auch bei dem Monte-Carlo-Ansatz dient eine vorgegebene Partikelbruchfunktion als Eingabe. In einem beliebigen Intervall „i“ lässt sich die mittlere Partikelbruchrate nach folgender Gleichung berechnen:

$$\bar{\Phi}_{\text{Rate},i} = \frac{\phi(i+1) - \phi(i)}{t(i+1) - t(i)} \quad [1/s] \quad 5.1$$

mit: $\phi(i)$ - Partikeldefektanteil zu Beginn des Intervalls „i“
 $t(i)$ - Zeit zu Beginn des Intervalls „i“ [s]
 i - Index des Intervalls

Jedes Intervall der vorgegebenen Kurve wird nochmals in Rechenzeitschritte unterteilt. In jedem Rechenzeitschritt innerhalb eines Intervalls i versagen demnach:

$$\Delta\phi_i = \bar{\Phi}_{\text{Rate},i} \cdot \Delta t_i \quad 5.2$$

Partikel. Für jedes intakte Partikel wird zu jedem Rechenzeitschritt per Zufallsgenerator bestimmt, ob das Partikel versagt oder nicht. Die Wahrscheinlichkeit p_i für einen Partikelbruch ist gegeben durch:

$$p_i = \Delta\phi_i \cdot n_{\text{CPS,Int}} \quad 5.3$$

Üblicherweise wird in einer Spaltproduktfreisetzungsrechnung berücksichtigt, dass der Partikeldefektanteil aufgrund unterschiedlicher Temperatur- und Neutronenflussverhältnisse über das Corevolumen variiert. Im Einklang zu den Rechnungen in [VER2001] wurde für jede Zone des aktiven Cores die gleiche zeitliche Defektanteilfunktion angenommen. Die Verteilung der vorgegebenen Anzahlen an Defektpartikeln über alle Brennelemente ist in Abbildung 5.8 wiedergegeben. Zu sehen ist, dass die Defektpartikel normalverteilt über alle Brennelemente vorliegen.

Falls mehrere Compacts innerhalb eines prismatischen Brennelements betrachtet werden, so werden den Compacts in der Rechnung dieselben Randbedingungen aufgeprägt, da eingehende Daten nicht höher aufgelöst vorliegen. Lediglich die zeitliche Entwicklung der Anzahl an Defektpartikeln kann aufgrund des Monte-Carlo-Verfahrens für die verschiedenen Compacts unterschiedlich ausfallen. Allerdings konnte gezeigt werden, dass die Simulation mehrerer Compacts pro prismatischem Brennelement keinen nennenswerten Einfluss auf den zeitlichen Verlauf der Freisetzungsraten hat.

Die Compacts werden in der Rechnung als Hohlzylinder mit einem inneren Plenum abgebildet. Aufgrund des sowohl nach innen als auch nach außen vorliegende Konzentrationsgefälles gibt es einen Diffusionsstrom in beide Richtungen. Im Modell wurde angenommen, dass das innere Plenum

ein abgeschlossenes Volumen darstellt und nicht in direktem Kontakt steht mit dem Spalt zwischen der Oberfläche des Compacts und dem Brennstab. Somit findet im Modell kein Abtransport von Spaltprodukten aus dem Plenum statt, so dass die Konzentration im inneren Plenum, aufgrund der über die innere Mantelfläche austretender Spaltprodukte, schnell zunimmt. Unter stationären Bedingungen wird schnell eine Gleichgewichtskonzentration des jeweiligen Spaltproduktes im inneren Plenum erreicht. Bei stationären Betriebsbedingungen findet dann nur ein Transport von Spaltprodukten nach außen statt.

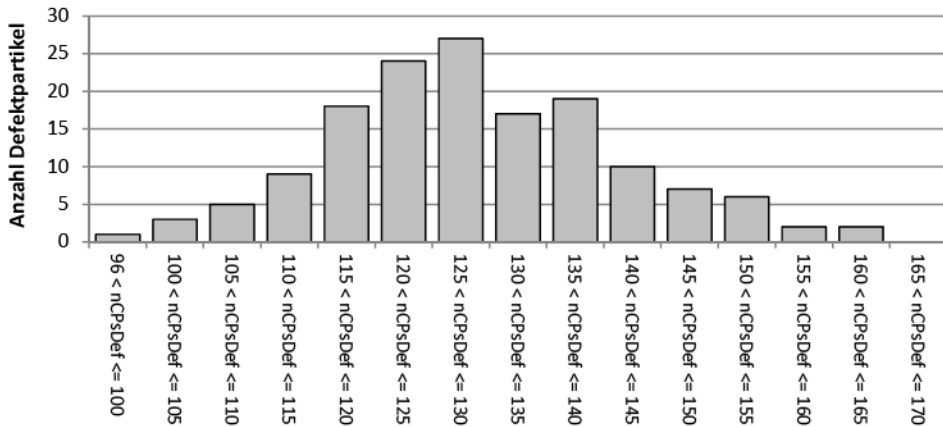


Abbildung 5.8: Verteilung der Defektpartikelanzahl je Compact (nCPsDef) über alle 150 Brennelemente im HTTR

Abbildung 5.9 zeigt deutlich, dass die Cs-137-Freisetzungsrate mit Beginn der Hochtemperaturphase, in der die mittlere Kühlgasaustrittstemperatur bei 950°C liegt, ansteigt.

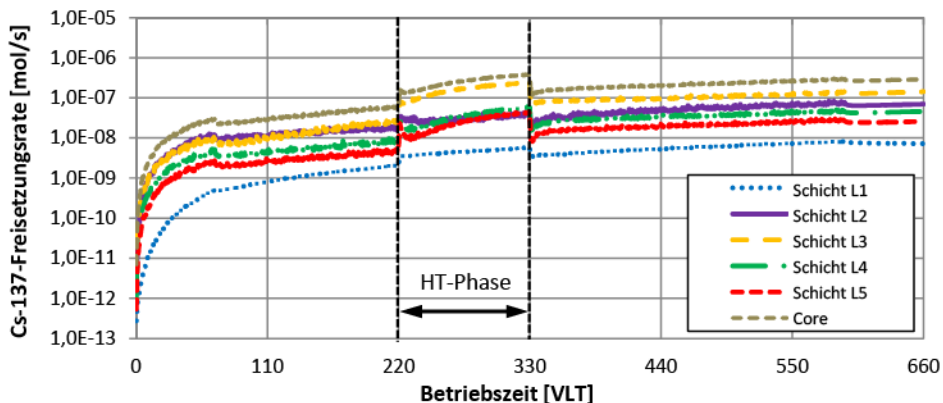


Abbildung 5.9: Zeitliche Entwicklung der Cs-137 Freisetzungsrates für die unterschiedlichen Brennelementschichten während des Standard Operation Plans (Brennelementschichten sind von oben nach unten durchnummeriert)

Der Partikelbruchanteil nimmt linear mit der Zeit zu. Dabei wird im Modell der Zusammenhang zwischen der Brennstofftemperatur und Partikelversagen vernachlässigt, da dieser in der

vorgegebenen Partikelbruchanteilkurve nicht berücksichtigt wird. Nach Ende der Hochtemperaturphase sinkt die Freisetzungsrates für Cs-137 wieder auf das ursprüngliche Niveau, das bei einer Fortsetzung des 850°C-Betriebs erwartet worden wäre. Die Fluktuationen nehmen ab 600 VLT ab, da ab diesem Zeitpunkt laut Auslegungswerten kein zusätzliches Partikelversagen auftritt.

Abbildung 5.10 zeigt, wie die Bestimmung der Defektpartikel durch den Zufallsgenerator zu kleineren Fluktuationen in der Freisetzungsrechnung führt.

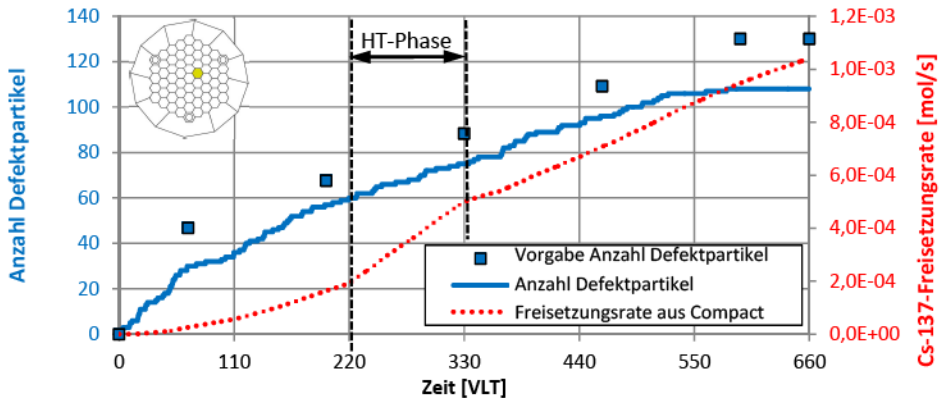


Abbildung 5.10: Brennstofftemperatur, Anzahl Defektpartikel und Cs-137-Freisetzungsrates aus dem Compact (Brennelementschicht L3, Block B02)

Die durch Partikelbrüche unverzügerte Freisetzung der Spaltprodukte, die vorher zu einer deutlichen Spitze in der Freisetzungsrates führten (siehe Abbildung 5.7), wird bei diesem Ansatz über alle Rechenzeitschritte verteilt. In Abbildung 5.10 ist die Brennstofftemperatur und die Anzahl der Defektpartikel und die Cs-137 Freisetzungsrates eines willkürlich ausgewählten Compacts dargestellt. Dieses Compact befindet sich in der obersten Brennelementschicht in der Nähe der Mittelachse. Die diskrete Unterscheidung zwischen defekten und intakten Partikeln ist klar zu erkennen, es treten nur ganzzahlige Defektpartikel auf (durchgezogene Linie). Da diese Anzahl unabhängig von der Brennstofftemperatur vorgegeben wird, ist während der Hochtemperaturphase kein deutlicher Anstieg der Defektanzahl zu verzeichnen. Zum Vergleich sind die durch die JAEA vorgegebenen Defektpartikelzahlen in ihrer zeitlichen Entwicklung eingetragen. Für dieses Compact bleiben die vorgegebenen Stützpunkte zu jedem Zeitpunkt unterhalb der mit Hilfe der Monte-Carlo-Simulation ermittelten Defektanzahlen. Bei Bestrahlungsende werden insgesamt 108 defekte Partikel erwartet. Diese Defektanzahl entspricht einem Bruchanteil von 0,83. Dieser für einen HTR geringer Leistung vergleichsweise hohe Bruchanteil lässt sich durch die hohen, lokalen Brennstofftemperaturspitzen erklären.

5.3 Vergleich der Ergebnisse mit früherer Studie

In diesem Abschnitt werden die mit STACY berechneten Freisetzungsverläufe dargestellt und mit Verläufen aus einer früheren Studie [VER2001] verglichen. Bei dieser Studie wurden relative Freisetzungsrates für jede Brennelementschicht im HTTR mit dem Code FRESKO-II ermittelt und mit den durch den japanischen Code FORNAX [MUT2000] erzielten Ergebnissen verglichen [VER2001].

Der JAEA-Freisetzungscode FORNAX erlaubt zusätzlich die Betrachtung von Partikeln mit einer partiell beschädigten SiC-Schicht [VER1993]. Des Weiteren wird der Spalt zwischen Compact und Brennstab abgebildet [OKA]⁸. In [OKA] werden FORNAX-Ergebnisse für einen prismatischen VHTR vorgestellt. In diesem Abschnitt wird die Freisetzungsrechnung für Cs-137 wiederholt und anschließend mit den Rechenergebnissen von FRESCO-II und FORNAX verglichen.

Mit FRESCO-II konnten nur kugelförmige Compacts simuliert werden. Der angenommene Diffusionskoeffizient im Matrixgraphit war jedoch um Größenordnungen höher als die im Partikel, so dass die Rückhaltung im Graphit sehr gering ist und damit die Vergleichbarkeit mit einem Compact in erster Näherung gegeben war. Das Modell sah nicht die Möglichkeit vor, die bei den Compacts im Innern vorhandenen brennstofffreie Zone zu modellieren.

Die Modellerweiterung in STACY dagegen ermöglicht es, Hohlräume abzubilden und brennstofffreie und brennstoffhaltige Schichten innerhalb der Brennstoffmatrix zu definieren. Im Falle eines Compacts wird die dreidimensionale Geometrie auf eine zweidimensionale Geometrie reduziert, wobei eine repräsentative Temperatur und ein repräsentativer Neutronenfluss angesetzt werden. Aufgrund der geringen Höhe des Compacts wird sich diese Vereinfachung kaum auf das Ergebnis auswirken.

Aufgrund des zu Beginn der Simulation großen Temperaturgradienten und des kleinen Volumens im Innern des Compacts führen sonst übliche Zeitschrittweiten (in Größenordnung von Stunden) zu numerischen Instabilitäten. Die berechnete Freisetzungsrate hat eine zu schnell ansteigende Spaltproduktkonzentration im stagnierenden Helium zur Folge, die stark von der am Anfang des Zeitschrittes vorliegenden Spaltproduktkonzentration abweicht. Im darauf folgenden Zeitschritt würde somit ein großes Konzentrationsgefälle in Richtung des Compacts vorliegen, wodurch ein Nettostrom an Spaltprodukten vom Helium ins Compact entstünde. Dieses alternierende Verhalten würde sich von Zeitschritt zu Zeitschritt wiederholen. Die stark veränderliche Freisetzungsrate macht es notwendig, Zeitschrittgrößen im Bereich einer Sekunde zu wählen, damit die numerisch bedingten Fluktuationen vermieden werden.

Eine Art Gleichgewichtskonzentration im stagnierenden Helium, die mit der Zeit nur langsam ansteigt, wird bei kurzer Zeitschrittweite nach wenigen Zeitschritten erreicht. Eine Vernachlässigung dieses nach innen entweichenden Spaltproduktstromes hat nur eine geringe Auswirkung auf die Spaltproduktfreisetzung nach außen. Optional kann die Freisetzung nach innen vernachlässigt werden, damit weiterhin mit Zeitschrittweiten im Bereich einiger Stunde gerechnet werden kann.

Die Positionen der einzelnen Brennelementblöcke des HTTR-Cores wurden nicht verändert. Demnach ist es nicht notwendig, das Brennstoffmanagement abzubilden. In Abbildung 5.11 sind die mit STACY und FRESCO-II berechneten relativen Cs-137-Freisetzungsraten für vier von insgesamt fünf Brennelementschichten bei Auslegungswerten dargestellt. Die Ergebnisse der vierten Brennelementschicht sind vergleichbar mit denjenigen der fünften Brennelementschicht und sind der Übersichtlichkeit halber nicht dargestellt. Bei den mit FRESCO-II ermittelten Kurven sind fünf abrupte Anstiege zu erkennen. Diese sind auf den treppenförmigen Verlauf der Partikelbruchanteilfunktion zurückzuführen.

⁸ Datum der Publikation unbekannt

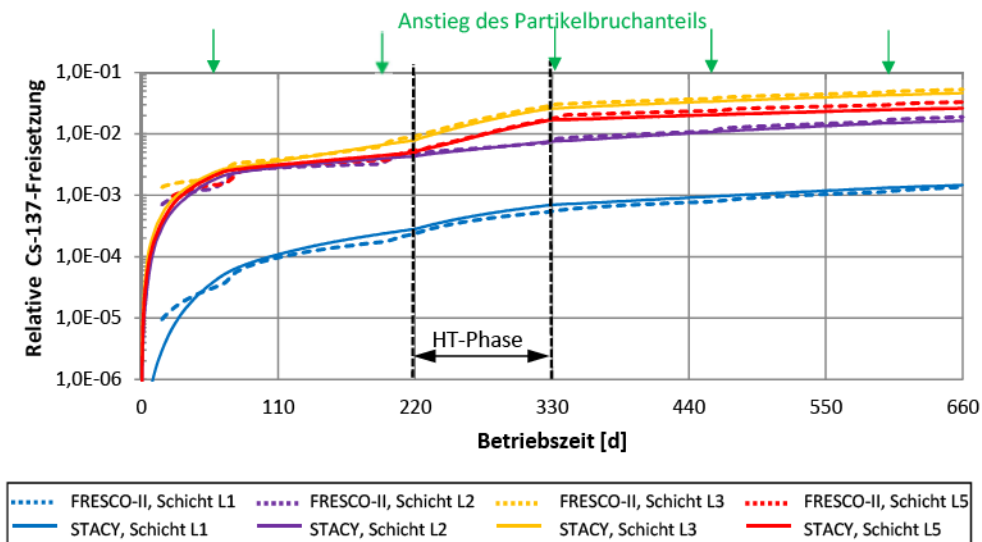


Abbildung 5.11: Mit FRESKO-II [VER2001] und STACY berechnete relative Cs-137-Freisetzungsraten im HTTR bei Annahme von Auslegungswerten

Bedingt durch den hohen Auslegungswert für den Partikelbruchanteil ist auch die errechnete relative Freisetzungsraten entsprechend hoch. Durch die Berücksichtigung der realitätsnahen Compact-geometrie in STACY ist die Freisetzungsraten im Einklang zu den Aussagen in Abschnitt 2.5.6 zu Beginn geringer als bei FRESKO-II.

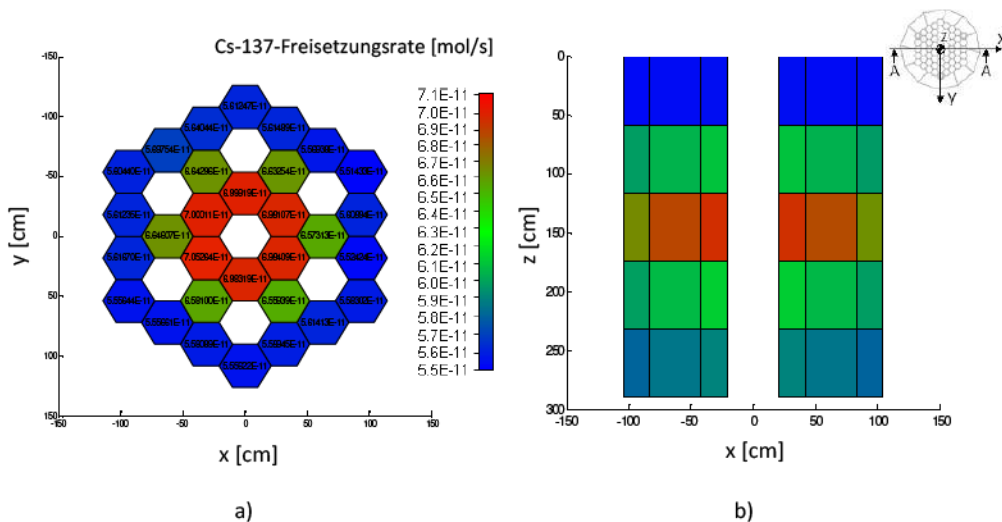


Abbildung 5.12: Räumliche Verteilung der Cs-137-Freisetzungsraten bei einer Betriebszeit des HTTR von 660 Volllasttagen (Auslegungsdaten, Werte gelten jeweils für das gesamte prismatische Brennstoffelement)

a) Horizontaler Schnitt durch Brennelementschicht L3 (Draufsicht)

b) Vertikaler Schnitt A-A durch das Core (nicht maßstabsgetreu)

Durch die zusätzliche Auflösung des Cores in radialer Richtung werden die unterschiedlichen Brennelementtemperaturen innerhalb einer Schicht berücksichtigt. Bei FRESKO-II wird für jede Brennelementschicht exemplarisch der Block mit der höchsten Brennstofftemperatur, dem höchsten Abbrand und der höchsten Neutronenfluenz abgebildet. Dies führt dazu, dass die STACY-Ergebnisse insgesamt geringfügig niedriger ausfallen. Die räumliche Verteilung der Spaltproduktfreisetzungsraten in der Brennelementschicht mit den höchsten Werten ist in Abbildung 5.12 dargestellt.

Das Schnittbild zeigt, dass das Maximum der Freisetzungsrates in dieser Brennelementschicht dort auftritt, wo sich die maximalen mittleren Temperaturen befinden (siehe Abbildung 5.12a). Gleiches gilt für das vertikale 2D-Schnittbild in Abbildung 5.12b. Abbildung 5.13 zeigt die Cs-137-Freisetzungsraten bei der Berücksichtigung von Erwartungswerten.

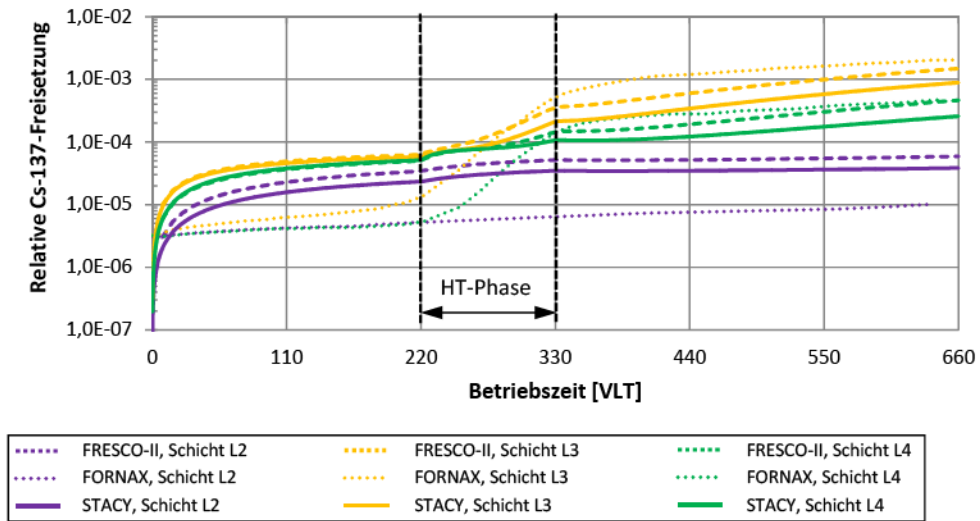


Abbildung 5.13: Mit FRESKO-II [VER2001], FORNAX [VER2001] und STACY berechnete relative Cs-137-Freisetzungsraten im HTTR bei Annahme von Erwartungswerten

Die Diskrepanzen zwischen FORNAX und STACY, als Weiterentwicklung von FRESKO-II, sind weiterhin gegeben. Bei Erwartungswerten ist der Einfluss der Temperatur auf die Freisetzungsrates größer. Aus diesem Grund liegen die mit STACY ermittelten Freisetzungsrates unterhalb derjenigen von FRESKO-II.

Die der Rechnung zugrunde liegenden Temperaturverläufe werden allerdings nicht aufgeführt. Die Cs-137-Rechnung zeigt, dass die zusätzliche Rückhaltung aufgrund der Ummantelung mit zunehmender Zeit abnimmt. Die Vernachlässigung des Mantels ist, auf jeden Fall für Cs-137, eine konservative erste Näherung. Mit zunehmender Temperatur nimmt die Cs-137-Rückhaltefähigkeit sowohl des Compacts als auch der Ummantelung ab, so dass die Rückhaltefähigkeit der Partikelbeschichtung ausschlaggebend wird [OKA]. Bei einer zukünftigen Programmerweiterung von STACY wäre es sinnvoll, die Sorptionsvorgänge beim Spaltprodukttransport durch den Spalt mit zu berücksichtigen.

Abschließend werden die mit STACY berechneten Freisetzungsanteile mit denen von FRESKO-II berechneten Anteilen verglichen. Im ersten Schritt werden die mit FRESKO-II durchgeführten Rechnungen mit STACY wiederholt. Bei diesen Rechnungen findet eine schichtweise Betrachtung ohne Auflösung in der Schicht statt. Dabei sind die Diskrepanzen aufgrund kleiner Änderungen sehr klein (siehe Tabelle 5.4 und 5.5).

Tabelle 5.4: Vergleich der mit STACY und FRESKO-II berechneten relativen Freisetzungsanteile des HTTR bei Erwartungswerten

Freisetzungsanteile nach 660 Tagen						Änderung STACY mit Auflösung gegenüber FRESKO-II [%]
Nuklid	Brenn- element- schicht / Core	Schichtweise Berechnung (ohne Auflösung der Blöcke innerhalb der Schicht)			Brenn- element- weise Berechnung mit Auflösung	
		FRESKO-II (Kugel)	STACY (Kugel)	STACY (Zylinder)	STACY (Zylinder)	
Sr-90	L1	$3,1 \cdot 10^{-9}$	$3,1 \cdot 10^{-9}$	$1,1 \cdot 10^{-9}$	$6,5 \cdot 10^{-10}$	-79
	L2	$3,3 \cdot 10^{-6}$	$3,3 \cdot 10^{-6}$	$4,7 \cdot 10^{-6}$	$3,0 \cdot 10^{-6}$	-8
	L3	$3,0 \cdot 10^{-4}$	$3,0 \cdot 10^{-4}$	$3,2 \cdot 10^{-4}$	$2,2 \cdot 10^{-4}$	-28
	L4	$9,7 \cdot 10^{-5}$	$9,7 \cdot 10^{-5}$	$1,1 \cdot 10^{-4}$	$7,1 \cdot 10^{-5}$	-26
	L5	$2,0 \cdot 10^{-4}$	$1,9 \cdot 10^{-4}$	$2,1 \cdot 10^{-4}$	$1,3 \cdot 10^{-4}$	-34
	Core	$1,1 \cdot 10^{-4}$	$1,1 \cdot 10^{-4}$	$1,2 \cdot 10^{-4}$	$1,1 \cdot 10^{-4}$	-29
Cs-137	L1	$1,6 \cdot 10^{-6}$	$2,3 \cdot 10^{-6}$	$2,0 \cdot 10^{-6}$	$5,4 \cdot 10^{-7}$	-67
	L2	$5,9 \cdot 10^{-5}$	$6,5 \cdot 10^{-5}$	$5,6 \cdot 10^{-5}$	$3,8 \cdot 10^{-7}$	-35
	L3	$1,5 \cdot 10^{-3}$	$1,5 \cdot 10^{-3}$	$1,3 \cdot 10^{-3}$	$8,9 \cdot 10^{-5}$	-41
	L4	$4,8 \cdot 10^{-4}$	$4,7 \cdot 10^{-4}$	$4,0 \cdot 10^{-4}$	$2,6 \cdot 10^{-4}$	-47
	L5	$6,6 \cdot 10^{-4}$	$6,4 \cdot 10^{-4}$	$5,5 \cdot 10^{-4}$	$3,1 \cdot 10^{-4}$	-52
	Core	$5,6 \cdot 10^{-4}$	$5,5 \cdot 10^{-4}$	$4,7 \cdot 10^{-4}$	$1,1 \cdot 10^{-4}$	-44
I-131	L1	$4,5 \cdot 10^{-6}$	$4,5 \cdot 10^{-6}$	$4,0 \cdot 10^{-6}$	$1,7 \cdot 10^{-4}$	-63
	L2	$7,3 \cdot 10^{-6}$	$7,3 \cdot 10^{-6}$	$6,4 \cdot 10^{-6}$	$2,9 \cdot 10^{-6}$	-60
	L3	$8,6 \cdot 10^{-6}$	$8,6 \cdot 10^{-6}$	$7,5 \cdot 10^{-6}$	$5,3 \cdot 10^{-6}$	-38
	L4	$8,0 \cdot 10^{-6}$	$8,0 \cdot 10^{-6}$	$7,0 \cdot 10^{-6}$	$5,3 \cdot 10^{-6}$	-34
	L5	$8,0 \cdot 10^{-6}$	$8,0 \cdot 10^{-6}$	$7,0 \cdot 10^{-6}$	$3,8 \cdot 10^{-6}$	-52
	Core	$7,3 \cdot 10^{-6}$	$7,3 \cdot 10^{-6}$	$6,4 \cdot 10^{-6}$	$1,1 \cdot 10^{-4}$	-48

Im zweiten Schritt wird eine ähnliche Berechnung mit STACY durchgeführt. Das Compact wird jetzt als Zylinder modelliert. Die berechneten Freisetzungsanteile ändern sich aufgrund der geänderten Geometrie deutlich. Im letzten Schritt wird für jeden Brennstoffblock anstelle von jeder Schicht eine Freisetzungsrechnung durchgeführt. Insgesamt verringern sich die berechneten relativen Spaltproduktfreisetzungsanteile für jedes Nuklid. Je nach Nuklid beträgt die Änderung für das gesamte Core 14 bis 48 %.

Bei Kugelhaufenreaktoren bewegen sich die Brennelemente im Kugelhaufen kontinuierlich, wodurch die Brennstoffelemente mit einem zeitlich veränderlichen Neutronenfluss bestrahlt werden. Im Falle einer Brennstoffstrategie, bei der die Brennelemente das Core mehrfach durchlaufen weist das Inventar kurzlebiger Nuklide somit einen zyklischen Verlauf auf. Wie bereits in Abschnitt 2.5.3 besprochen, hat die Verwendung dieses korrekten zeitlichen Inventarverlaufs anstelle eines stark

vereinfachten Inventarverlaufs nach FRESCO-II einen großen Einfluss auf den zeitlichen Freisetzungsvorgang kurzlebiger Nuklide.

Tabelle 5.5: Vergleich der mit STACY und FRESCO-II berechneten relativen Freisetzungsteile des HTTR bei Auslegungswerten

Freisetzungsteile nach 660 Tagen						Änderung STACY mit Auflösung gegenüber FRESCO-II []
Nuklid	Brenn- element- schicht / Core	Schichtweise Berechnung (ohne Auflösung der Blöcke innerhalb der Schicht)			Brenn- element- weise Berechnung mit Auflösung	
		FRESCO-II (Kugel)	STACY (Kugel)	STACY (Zylinder)	STACY (Zylinder)	
Sr-90	L1	$4,3 \cdot 10^{-8}$	$3,4 \cdot 10^{-8}$	$5,4 \cdot 10^{-8}$	$4,0 \cdot 10^{-8}$	-18
	L2	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$1,2 \cdot 10^{-3}$	$9,1 \cdot 10^{-4}$	-17
	L3	$5,2 \cdot 10^{-2}$	$5,2 \cdot 10^{-2}$	$4,7 \cdot 10^{-2}$	$4,3 \cdot 10^{-2}$	-16
	L4	$1,8 \cdot 10^{-2}$	$1,8 \cdot 10^{-2}$	$1,8 \cdot 10^{-2}$	$1,5 \cdot 10^{-2}$	-18
	L5	$2,3 \cdot 10^{-2}$	$2,2 \cdot 10^{-2}$	$2,2 \cdot 10^{-2}$	$1,7 \cdot 10^{-2}$	-26
	Core	$1,9 \cdot 10^{-2}$	$1,9 \cdot 10^{-2}$	$1,8 \cdot 10^{-2}$	$1,1 \cdot 10^{-4}$	-18
Cs-137	L1	$1,3 \cdot 10^{-3}$	$1,5 \cdot 10^{-3}$	$1,4 \cdot 10^{-3}$	$1,5 \cdot 10^{-3}$	13
	L2	$1,9 \cdot 10^{-2}$	$1,9 \cdot 10^{-2}$	$1,6 \cdot 10^{-2}$	$1,6 \cdot 10^{-2}$	-13
	L3	$5,3 \cdot 10^{-2}$	$5,3 \cdot 10^{-2}$	$4,5 \cdot 10^{-2}$	$4,6 \cdot 10^{-2}$	-13
	L4	$3,4 \cdot 10^{-2}$	$3,4 \cdot 10^{-2}$	$2,9 \cdot 10^{-2}$	$2,9 \cdot 10^{-2}$	-15
	L5	$3,3 \cdot 10^{-2}$	$3,2 \cdot 10^{-2}$	$2,7 \cdot 10^{-2}$	$2,6 \cdot 10^{-2}$	-22
	Core	$2,9 \cdot 10^{-2}$	$2,8 \cdot 10^{-2}$	$2,4 \cdot 10^{-2}$	$1,1 \cdot 10^{-4}$	-14
I-131	L1	$3,9 \cdot 10^{-4}$	$3,9 \cdot 10^{-4}$	$3,3 \cdot 10^{-4}$	$3,2 \cdot 10^{-4}$	-20
	L2	$9,4 \cdot 10^{-4}$	$9,2 \cdot 10^{-4}$	$7,9 \cdot 10^{-4}$	$7,5 \cdot 10^{-4}$	-20
	L3	$1,8 \cdot 10^{-3}$	$1,8 \cdot 10^{-3}$	$1,5 \cdot 10^{-3}$	$1,3 \cdot 10^{-3}$	-26
	L4	$1,2 \cdot 10^{-3}$	$1,2 \cdot 10^{-3}$	$9,9 \cdot 10^{-4}$	$9,2 \cdot 10^{-4}$	-21
	L5	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$9,1 \cdot 10^{-4}$	$8,5 \cdot 10^{-4}$	-24
	Core	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$9,3 \cdot 10^{-4}$	$1,1 \cdot 10^{-4}$	-23

Beim HTTR wird der Brennstoff bis zum Zielabbrand nicht erneut positioniert. Hierdurch tritt die vorher beschriebene Periodizität beim zeitlichen Inventarverlauf nicht auf, wodurch die vereinfachte Inventarberechnung eine gute erste Näherung darstellt. Somit werden die berechneten Freisetzungswerte im Falle des HTTR vornehmlich von der realitätsnäheren Beschreibung der Brennstoffgeometrie als Zylinder und der räumlichen Auflösung beeinflusst und nicht durch die genauere Berechnung des Inventars. Aus diesem Grund ist die Abnahme der mit STACY berechneten Freisetzungsteile gegenüber der mit FRESCO-II berechneten Anteile für sowohl langlebige als auch kurzlebige Nuklide relativ ähnlich.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Eine zuverlässige Vorhersage des radiologischen Quellterms ist eine der wichtigsten Aspekte beim Sicherheitsnachweis einer kerntechnischen Anlage. In bisherigen Analysen wurde das Freisetzungsverhalten kugelförmiger Brennelemente aus Hochtemperaturreaktoren (*HTR*) jeweils durch Abschätzung maximaler Freisetzungsraten ausgewählter Brennelemente simuliert. Durch eine Wahl repräsentativer Brennelemente wurde so auf das Freisetzungsverhalten des gesamten Cores geschlossen. Bedingt durch die heutzutage verfügbare Rechnerleistung und die Anwendung aktueller Techniken in der Softwareentwicklung können Modellverbesserungen und -erweiterungen vorgenommen werden, die eine genauere Berechnung des Freisetzungsverhaltens ermöglichen.

Am Forschungszentrum Jülich wurden eine Reihe von Rechenprogrammen entwickelt, die die Freisetzung radiologisch relevanter Nuklide aus dem Brennelement und die Verteilung im Core (Reaktorkern) beschreiben (*FRESCO*) und eine Vorhersage der Brennstoffintegrität erlauben (*PANAMA*). Des Weiteren existiert ein Modell zur Bestimmung abgelagerter Nuklidinventare auf metallischen Oberflächen im Primärkreis (*SPATRA*). Im Rahmen dieser Arbeit werden diese Rechenprogramme zunächst analysiert, programmtechnisch erneuert und restrukturiert. Dabei werden bisher nicht dokumentierte Details der Modellierung aus dem Quellcode extrahiert und ausführlich beschrieben. Die einzelnen Programme werden dann zum *Code Source Term Analysis Code System (STACY)* gekoppelt, der die Ergebnisse der Einzelprogramme vollends reproduziert.

Darüber hinaus werden in STACY eine Reihe von Modellerweiterungen vorgenommen, um erkannte Defizite der Einzelprogramme zu beseitigen. In bisherigen Freisetzungsprogrammen wird das radiale Temperaturprofil im Brennelement vernachlässigt. Stattdessen wird angenommen, dass die maximale Zentraltemperatur über das gesamte Brennelement vorliegt. Mit STACY können nun detaillierte Temperaturprofile innerhalb der Brennelemente berechnet werden. Bei Verwendung eines realistischen radialen Temperaturprofils sinkt die zeitlich gemittelte Freisetzungsrate für die in Rahmen dieser Arbeit betrachteten Nuklide im Falle des HTR-Modul jedoch nur um wenige Prozent. Deutlich größer ist der Effekt für die Berechnung der Partikeldefektanteile. Bisher wurde eine zeitunabhängige Temperaturdifferenz von 70 K zwischen Partikeloberfläche und Partikelkern bei modularen HTR angesetzt. Wird in STACY beim HTR-Modul das berechnete Temperaturprofil verwendet, so reduziert sich die Partikelbruchrate um etwa eine Größenordnung. Eine weitere Modellerweiterung in STACY betrifft die Schichtdicken der Brennstoffpartikel. Wurden bisher lediglich Partikel mit nominellen Schichtdicken in der Berechnung des Partikelbruchanteils berücksichtigt, kann nun eine Schichtdickenverteilung der Brennstoffpartikel vorgegeben werden. So erhöhen sich die Partikelbruchanteile um etwa eine Größenordnung, wenn die in den Brennstoff-Spezifikationen angegebenen Standardabweichungen bei der Berechnung berücksichtigt werden. Dabei ist der Einfluss der Verteilung der Pufferschichtdicke am größten. Es empfiehlt sich somit, die Brennstoffspezifikation hinsichtlich maximaler Schichtdickenvariationen an die heute produzierbare, deutlich kleinere Schichtdickenvariation anzunähern. Eine weitere Modellverbesserung betrifft die Berechnung des Gasdrucks in den Partikeln. Der Wechsel von der idealen Gasgleichung auf die Redlich-Kwong-Gasgleichung hat jedoch nur einen geringen Einfluss auf die Druckentwicklung im Partikel, so dass die mit dem Druckkesselmodell berechneten Partikelbruchanteile näherungsweise gleich bleiben.

In den bisher verwendeten Freisetzungsprogrammen konnten keine zeitabhängigen Nuklidinventare berücksichtigt werden und zudem nur relative Freisetzungsrechnungen durchgeführt werden. In STACY können nun auch absolute Inventare sowie zeitabhängige Aufbauprozesse von Spaltnukliden berechnet werden. Durch die Berücksichtigung korrekter Inventare von Sr-90 die mittlere Sr-90-Freisetzungsrate eines repräsentativen Brennelements um etwa 10 % zunimmt. Der Zeitpunkt maximaler Freisetzung ist bei Rechnungen mit STACY und FRESKO-II für langlebige Nuklide nahezu identisch. Bei dem kurzlebigen Nuklid I-131 hingegen zeigen die neuen Ergebnisse eine Abnahme der mittleren Freisetzungsrate um etwa 3 %. Laut FRESKO-II wird die maximale Freisetzungsrate am Ende eines jeden Durchlaufs durch das Core erreicht. Bei einer korrekten Berücksichtigung des Inventarverlaufs liegt das Freisetzungsmaximum in etwa auf halber Corehöhe, weil das Inventar hier am größten und die Brennstofftemperatur auf einem moderaten Niveau ist.

Ein neuer Aspekt in STACY ist die Möglichkeit der Behandlung zylinderförmiger Brennstoffanordnungen (Compacts). Frühere Simulationen von Compacts gingen von einer Kugel gleichen Volumens aus. Die Beschreibung der Fick'schen Diffusion für Zylindergeometrien erlaubt nun die realitätsnahe Beschreibung von Compacts und Reflektorbohrungen. Diese Erweiterung wird sowohl mit analytisch lösbaren Fällen als auch mit Daten aus einem aktuellen Ausheizexperiment verglichen. Die Ergebnisse der numerischen Lösung und der analytischen Lösung sind hierbei identisch. Die im Experiment gemessenen Freisetzungsanteile werden jedoch in den Nachrechnungen sowohl mit STACY als auch mit Codes anderer Institutionen deutlich überschätzt. Dies liegt vor allem an dem konservativen Charakter des verwendeten Referenzdatensatzes von Diffusionskoeffizienten. Die gemessenen Freisetzungsverläufe können aber nicht vollständig durch die Fick'sche Diffusion beschrieben werden, da die Verläufe auf einem recht konstanten Niveau bleiben, was für Fick'sche Diffusion untypisch ist.

Die Kopplung der Einzelprogramme hin zu STACY ist die Voraussetzung für die Durchführung von „best-estimate“ Voll-Core-Freisetzungsrechnungen. Hierzu wird ein detailliertes Rechenmodell zur räumlich hoch aufgelösten Spaltproduktfreisetzungssimulation von Kugelhaufenreaktoren erstellt. Dieses berücksichtigt eine modellabhängig repräsentative Anzahl sogenannter Tracer-Brennelemente, deren unterschiedliche Laufwege durch das Core im Einzelnen nachvollzogen werden. Der individuelle Weg durch das Core wird mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode bestimmt. Ab einer bestimmten Anzahl betrachteter Brennelemente ändert sich dabei das Integral der freigesetzten Spaltproduktmenge nicht mehr. So ist es möglich, das gesamte Core des HTR-Modul mit etwa 4.000 Tracer-Brennelementen spaltprodukt-technisch, hinreichend, genau zu erfassen. Die Core-Auslegung sowie die Brennelementtemperaturen während der Kernaufheizphase werden mit dem Reaktorauslegungsprogramm VSOP berechnet. Durch eine Kopplung von STACY mit dem Abbrandcode *Topological Nuclide Transmutation (TNT)* kann nun unter Verwendung der mit VSOP generierten Breitgruppenflüsse auch die Inventarentwicklung jedes einzelnen Tracer-Brennelements in der Spaltproduktfreisetzungsrechnung berücksichtigt werden.

Im Zuge der Entwicklung von STACY ergab sich die Notwendigkeit, ein erweitertes Kugelfließmodell zu entwickeln. Der modifizierte VSOP-Ansatz (Stromröhrenmodell) in seiner Neuimplementierung erlaubt eine individuelle Verfolgung von Tracer-Brennelementen. Im weiteren Verlauf entstand daraus für das *HTR Code Package (HCP)* ein völlig neuer Ansatz zur Beschreibung des Kugelfließens mit dem Namen *Software for Handling of Universal Fuel Elements (SHUFLE)*. Das Modell erlaubt eine mit notwendiger Präzision und hinreichend schnelle Beschreibung des Kugelfließens und die

Betrachtung weiterer Aspekte, wie z. B. der Einfluss von Erdbeben auf den Kugelhaufen. Des Weiteren ermöglicht es SHUFLE, das Kugelfließen auf ein Gitter in Zylinderkoordinaten abzubilden, wodurch ein separates Gitter wie beim herkömmlichen Stromröhrenmodell überflüssig ist. In einem ersten Validierungsschritt wird gezeigt, dass SHUFLE ein gemessenes Verweilzeitspektrum korrekt reproduziert.

Als Referenzanlagen für die räumlich aufgelösten Spaltproduktfreisetzungsberechnungen werden der HTR-Modul (kugelförmige Brennelemente) und der HTTR (prismatische Brennelemente) ausgewählt. Mit Hilfe von Daten aus den Genehmigungsunterlagen wird das Gleichgewichtscore des HTR-Modul mit VSOP berechnet. Hierbei werden in Bezug auf die Simulation des Kugelfließens drei unterschiedliche Ansätze betrachtet. Dabei wird gezeigt, dass das einfachste Modell mit einer über den Radius konstanten Kugelfließgeschwindigkeit, wie auch in früheren Studien angenommen, bei dieser Referenzanlage ausreichend ist. Dies lässt sich durch das große Verhältnis von Höhe zu Durchmesser begründen.

Im Vergleich zu früheren Studien ergeben sich für das Gleichgewichtscore mit STACY um zwei Größenordnungen bzw. den Faktor 25 bis 50 geringere Freisetzungsraten für Cs-137 bzw. Sr-90. Ursache hierfür ist die Betrachtung einer für das Core repräsentativen Anzahl an Brennelementen. Da deren individuelle räumliche Temperatur- und Inventarverteilung berücksichtigt wird, kann das Freisetzungsverhalten des Kugelhaufens deutlich präziser als bisher berechnet werden. In der Kernaufheizphase fallen die mit STACY berechneten Freisetzungssätze ebenfalls deutlich niedriger aus. Je nachdem, ob Erwartungswerte oder Auslegungswerte als Eingabe verwendet werden, ist der Freisetzungssatz für Cs-137 um den Faktor 3 bis 15, für Sr-90 sogar um den Faktor 11 bis 65 geringer. Für I-131 wird allerdings ein um den Faktor zwei höherer Freisetzungssatz ermittelt. Letzteres kann auf die Inventarberechnung zurückgeführt werden, die in Rechnungen zum damaligen Genehmigungsverfahren mit FRESCO-I nur stark vereinfacht für eine OTTO-Beschickung durchgeführt wurde.

Einige HTR-Konzepte, wie z. B. der chinesische HTR-PM, orientieren sich stark an der Auslegung des HTR-Modul. Je nach Anforderung werden häufig die Reaktorleistung, der Zielabbrand und die mittlere Durchlaufzahl variiert. Deshalb werden in dieser Arbeit Variationen des HTR-Modul-Referenzkonzepts im Hinblick auf die Spaltproduktfreisetzung betrachtet. Zum Einen wird die Durchlaufzahl schrittweise auf 5 verringert. Diese Änderung beeinflusst das Leistungsprofil im Core und damit auch die Temperaturverteilung der Brennelemente. Ebenfalls ändern sich das Abbrandverhalten und damit die räumliche Inventarverteilung. Die Freisetzungsraten von I-131, Cs-137 und Sr-90 im Gleichgewichtscore werden durch die Reduktion der Durchlaufzahl jedoch nur unwesentlich beeinflusst. Die Änderung hat allerdings eine Auswirkung auf den Störfallverlauf. Mit abnehmender Durchlaufzahl wird die maximale Brennelementtemperatur in der Kernaufheizphase früher erreicht. Je nach Wahl des Partikelbruchmodells steigt die Cs-137-Freisetzung um den Faktor zwei (PANAMA) oder drei (Trompetenkurve) an, wenn die Durchlaufzahl von 15 auf 5 reduziert wird. Die freigesetzte Menge an I-131 während eines Kernaufheizstörfalls nimmt bei 5 Durchläufen im Vergleich zu 15 Durchläufen um etwa 50 % zu. Generell können die berechneten Temperaturen in der Kernaufheizphase mit einer früheren Studie in Einklang gebracht werden. Bei einer weiteren Auslegungsvariation des HTR-Modul wird der Zielabbrand auf $90.000 \text{ MWd}/t_{\text{SM}}$ bzw. $100.000 \text{ MWd}/t_{\text{SM}}$ erhöht. Dadurch steigen vornehmlich das Spaltproduktinventar und der Partikelbruchanteil im Core an. Bei einer Anhebung des Zielabbrandes auf $100.000 \text{ MWd}/t_{\text{SM}}$ hat sich

bis zu Störfallbeginn ein um etwa 24 % größeres Inventar an langlebigen Nukliden gebildet. Hierdurch verdoppelt sich die in den ersten 200 Stunden der Kernaufheizphase freigesetzte Cs-137-Menge und die Sr-90-Menge nimmt um 60 % zu. Aufgrund der Kurzlebigkeit von I-131 steigt dessen Inventar im Core lediglich um 3 % an, somit nimmt dessen freigesetzte Menge lediglich um 13 % zu.

Weiterhin wird die Spaltproduktfreisetzungverhalten des japanischen HTTR über 660 Volllasttage berechnet. Dabei wird für jeden der 150 Brennelementblöcke stellvertretend je ein Compact sowohl hinsichtlich des Abbrands sowie der Temperatur simuliert. Die räumliche Verteilung des Nuklidinventars wird mit Hilfe des Monte-Carlo-Programms Serpent ermittelt. Die Berücksichtigung der realen Zylindergeometrie hat für die betrachteten Nuklide jedoch nur eine geringe Auswirkung auf die Freisetzung der hier untersuchten Isotope, da die Rückhaltefähigkeit des Matrixgraphits im Compact gegenüber der des TRISO-Partikels eine untergeordnete Rolle spielt. Durch die räumlich aufgelöste Berechnung der Freisetzungsraten sind die berechnete Freisetzungswerte in etwa 29 % für Sr-90, 44 % für Cs-137 und 48 % für I-131 geringer bei Erwartungswerten im Vergleich zu einer publizierten FRESCO-II Rechnung.

Eine umfängliche Validierung von STACY zur freisetzungstechnischen Beschreibung des gesamten Cores steht in Ermangelung aktuell zur Verfügung stehender Daten somit noch aus. Daten des AVR sind aufgrund der Verwendung zahlreicher Brennstofftypen und Unsicherheiten bei der räumlichen Verteilung der Brennelemente nicht für einen Vergleich geeignet. In Zukunft könnten Daten existierender Anlagen (z. B. HTR-10, HTTR) oder sich im Bau befindlicher Anlagen (z. B. HTR-PM) herangezogen werden.

In einer zukünftigen Erweiterung des Programmpaketes STACY ist die Berechnung von Freisetzungsraten auch während der Einbrennphase, in der das frische Core in das Gleichgewichtscore überführt wird, denkbar. In der Genehmigungsphase muss nachgewiesen werden, dass die Grenzwerte für Freisetzungen unabhängig vom Zeitpunkt des Eintretens eingehalten werden. Während der Einbrennphase stellt sich für jeden einzelnen Rechenzeitschritt eine individuelle Kühlgastemperatur- und Neutronenflussverteilung ein. Des Weiteren ändert sich die räumliche Brennstoffzusammensetzung des Cores zeitlich sehr stark. Damit dies in STACY berücksichtigt werden kann, muss das Datenmodell erweitert werden. Des Weiteren müssen neben Brennstoffkugeln, die im Gleichgewichtscore zum Einsatz kommen, weitere Brennstoffkugeln mit einer anderen Zusammensetzung oder auch Blindkugeln berücksichtigt werden können. In STACY wird zurzeit bei einem Defektpartikel davon ausgegangen, dass der Partikelkern ohne jegliche Beschichtung vorliegt. In einer zukünftigen Version wäre es sinnvoll, Defektpartikel berücksichtigen zu können, bei denen die Beschichtung teilweise noch wirksam ist. Die Verwendung eines detailreicheren Partikelbruchmodells anstelle des rudimentären PANAMA-Modells, würde auch eine genauere Beschreibung des Defektpartikelanteils bei der Nachrechnung von Ausheizexperimenten erlauben.

Zum Zeitpunkt des Abschlusses dieser Arbeit ist STACY noch ein separater Code. Im Rahmen des HCP-Projektes wird STACY zukünftig als ein Modul des HCP für den Bereich Spaltproduktfreisetzung verantwortlich sein. Von einer Kopplung an ein dreidimensionales Kugelfließmodell und an eine erweiterte und verbesserte Thermohydraulik wird dann auch STACY profitieren und es steht zu vermuten, dass hierdurch weitere physikalische Erkenntnisse im Bereich der Spaltproduktfreisetzung von Hochtemperaturreaktoren gewonnen werden können.

7 Quellenverzeichnis

- [ALL1980] Allelein H.-J.: Spaltproduktverhalten - Speziell Cs-137 in HTR-TRISO-Brennstoffteilchen, Jül-1695, Dissertation an der RWTH-Aachen, Forschungszentrum Jülich, 1980
- [ALL2010] Allelein H.-J., Kasselmann St., Xhonneux A., Herber S.-C.: Entwicklung eines V/HTR Code Package, 5th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology (HTR2010), Prague, 2010
- [ANT1987] Anton: Modifikationen am Programmsystem FRESCO/ATM, Notiz 70.04025 im Projekt HTR-2M, Interatom, Bergisch Gladbach (Bensberg), 1987
- [ARE2009] Arens T. et. al.: Mathematik, Spektrum der Wissenschaft Verlag, Karlsruhe, 2009
- [AVR1966] N. N.: Versuchs-Atomkraftwerk mit Kugelhaufen-Hochtemperatur-Reaktor in Jülich, Atomwirtschaft-Atomtechnik, Sonderdruck aus Heft 5, 1966, Seiten 218 bis 271, 19 Beitrge, Verlag: Handelsblatt GmbH, Düsseldorf
- [BAB1992] Babilas C. H.: Untersuchung des Fließverhaltens kugelförmiger Brennelemente im HTR-Modul Abschlussbericht zur Einzelaufgabe 2.2.7-3, Siemens, Bergisch Gladbach (Bensberg), 1992
- [BAN1983] Banaschek, J.: Berechnungsmethoden und Analysen zum dynamischen Verhalten von Kraftwerksanlagen mit Hochtemperaturreaktor, Dissertation an der RWTH-Aachen, Aachen, 1983
- [BBC1982] N. N.: BBC/ HRB, D BBC/HRB 1020 82 DE, 1982
- [BEC2010] Beck J. M., Garcia C. B., Pincock L. F.: High Temperature Gas-Cooled Reactors, Lessons Learned Applicable to the Next Generation Nuclear Plant, Idaho National Laboratory, 2010
- [BED1966] Bedenig D.: Experimentelle Untersuchungen zum Fließverhalten eines Kugelhaufens im Hinblick auf den Brennelementkreislauf im Core eines Kugelhaufenreaktors, Dissertation, Forschungszentrum Jülich, 1966
- [BED1967] Bedenig D.: Ein theoretisches Modell zur Beschreibung des Kugelhaufenfließverhaltens im Core eines Kugelhaufen-Reaktors, Nuclear Engineering and Design 6, 1967
- [BED1971] Bedenig D.: Kugeln als Flüssigkeitsmodell, Wissenschaftsbuch des Jahres, 1971
- [BER1988] Berger-Rossa R.: Rückhaltung und Umverteilung von Spaltprodukten im Core und im Primärkreislauf von Hochtemperaturreaktoren bei hypothetischen Störfall-ereignissen, Dissertation an der RWTH-Aachen, 1988
- [BER2003] Bernnat W., Feltes W.: Models for Reactor Physics Calculations for HTR Pebble Bed Modular Reactors, Nuclear Engineering and Design 222, 2003

- [BEX2010] Bexten T., Böhmer M.: Vergleich von prismatischen und kugelförmigen Brennelementen für Hochtemperaturreaktoren und Erweiterung des PANAMA-Codes, Projektarbeit im Rahmen einer Dissertation, RWTH-Aachen, Aachen, 2010
- [BIN1974] Binkele L.: Ein Verfahren zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit von neutronbestrahlten Graphiten bei Temperaturen zwischen 50 und 1.000°C, Jül-1096-RW, Forschungszentrum Jülich, 1974
- [BON1971] Bonka H.: Entwicklung eines Spektralprogramms für kugelförmige Brennelemente sowie Untersuchungen über die Größe und Beeinflussbarkeit des Moderator-koeffizienten bei Hochtemperaturreaktoren, Jül-746, Forschungszentrum Jülich, 1971
- [BOO1957] Booth A. H.: Atomic Energy of Canada Ltd., Report AECL 496, 1957
- [BRO2010] Brockmann H.: TOTMOS: An Integral Transport Code for Calculating Neutron Spectra and Multigroup Cross Sections, Juel-4325, Forschungszentrum Jülich, Jülich, 2010
- [BUN2013] N. N.: Handbuch Reaktorsicherheit und Strahlenschutz, Bundesamt für Strahlenschutz, http://www.bfs.de/de/kerntechnik/sicherheit/hb_reaktorsicherheit.html, abgerufen am 23. November 2013
- [CLE1986] Cleveland J., Greene S.: Application of THERMIX-KONVEK Code to Accident Analysis of Modular Pebble Bed High Temperature Reactors (HTRs), TM-9905, ORNL, 1986
- [COL2012] Collin B.: AGR-1 Safety Test Predictions with PARFUME, VHTR R&D FY12 Technical Review Meeting, May 22-24, Salt Lake City, 2012
- [CRA1979] Crank J.: The Mathematics of Diffusion, Brunel University, Uxbridge, 1979
- [DAN1992] Dannert V.: Thermodynamische Mechanismen der Spaltproduktrückhaltung in kerntechnischen Anlagen, Forschungszentrum Jülich, 1992
- [DIN1990] N. N.: Berechnung der Nachzerfallsleistung der Kernbrennstoff von Hochtemperaturreaktoren mit kugelförmigen Brennelementen, DIN 25485
- [DRU1982] Drüke V., Litzow W., Paul N.: Ergebnisse der kritischen Experimente zur OTTO-Beladung an der kritischen Anlage Hochtemperaturreaktor (KAHTER), Forschungszentrum Jülich, Jül-Spez 187, Jülich, 1982
- [EHR1981] Ehrhardt K. D.: PLATO – Ein Programm zur Berechnung der Spaltproduktablagerung, Jül-Spez-135, Forschungszentrum Jülich, 1981
- [FOU2005] Fourie P.: Selection of Radio Nuclides to Study Radionuclide Behaviour Analysis Report, PBM, 2005
- [FRE2010] Freis D.: Störfallsimulationen und Nachbestrahlungsuntersuchungen an kugelförmigen Brennelementen für Hochtemperaturreaktoren, Dissertation an der RWTH-Aachen, 2010

- [FRI1976] Friskney C. A., Speight M. V.: A Calculation on the in-pile Diffusional Release of Fission Products Forming a General Decay Chain, Central Electricity Generating Board, Berkeley Nuclear Laboratories, Berkeley, 1976
- [FUE2005a] Fütterer M.: HFR-EU1bis, Irradiation Progress Report Cycles 04-08, 04-09, 05-01, 05-02, Project no. 337.2, Joint Research Centre, Petten, 2005
- [FUE2005b] Fütterer M.: HFR-EU1bis, Irradiation Progress Report Cycles 05-03, 05-04, 05-06, 05-07, Project no. 337.2, Joint Research Centre, Petten, 2005
- [FUE2005c] Fütterer M.: HFR-EU1bis, Irradiation Progress Report Cycles 05-08, 05-09, Project no. 337.2 rev. A, Joint Research Centre, Petten, 2005
- [FUE2008] Fütterer M. et al., Results of AVR fuel pebble irradiation at increased temperature and burn-up in the HFR Petten, Nuclear Engineering and Design 238, 2008
- [GAT1977] Gatt F. C.: Flow of Individual Pebbles in Cylindrical Vessels, Nuclear Engineering and Design 42(2): 265-275, 1977
- [GAU1995] Gauld I. C., Litwin K. A.: Verification and Validation of the ORIGEN-S Code and Nuclear Data Libraries, Atomic Energy of Canada Limited, Ontario, 1995
- [GER1993] Gerhards E.: Abbrandmessung am HTR-Modul-Reaktor, Forschungszentrum Jülich, 1993
- [GIF2002] N. N.: Generation IV International Forum, https://www.gen-4.org/gif/jcms/c_9260/public, abgerufen am 4. April 2012
- [HAA2012] Haas K. A.: Modellierung des HTR-Modul in VSOP, Forschungszentrum Jülich, 2012
- [HAA2013] Haag G.: Persönliche Mitteilung, 8. Juli 2013
- [HAE1971] Häfele W., Krämer H.: Technischer und wirtschaftlicher Stand sowie Aussichten der Kernenergie in der Kraftwirtschaft der BRD (Teil II), Jül-775, Forschungszentrum Jülich, Jülich, 1971
- [HAN2012] Hanson D.: Fuel Performance & Fission Product Transport Predictions for AGR-1, VHTR R&D FY12 Technical Review Meeting, May 22-24, Salt Lake City, 2012
- [HER2012] Herber S.-C., Friege N., Kasselmann St., Allelein H.-J.: First Steps towards a Validation of the New Burnup and Depletion Code TNT, Annual Meeting on Nuclear Technology, Stuttgart, 2012
- [HUN2012] Hunn J. D.: Compilation of Data from ORNL Characterization of German Reference Fuel Composite EUO 2358-2365, Idaho National Laboratory, 2012
- [IAE1997] IAEA: Fuel Performance and Fission Product Behaviour in Gas Cooled Reactors, IAEA-TECDOC-978, Wien, 1997

- [IAE2012] IAEA: The CRP-6 on "Advances in HTGR Fuel Technology", IAEA-TECDOC-1674, Wien, 2012
- [IAE2003] IAEA: Evaluation of High Temperature Gas Cooled Reactor Performance: Benchmark Analysis Related to Initial Testing of the HTTR and HTR-10, IAEA-TECDOC-1382, 2003
- [ITA2012] Itasca Consulting Group, Particle Flow Code in 3 Dimension – Online Manual, <http://www.itascacg.com/software/pfc3d>, abgerufen am 4. Januar 2012
- [JAH1983] Jahn W., Rehm W., Verfondern K.: Spezielle Analysen zum Temperatur- und Spaltproduktverhalten von HTR-Modul-Anlagen, Forschungszentrum Jülich, 1983
- [JAH1991] Jahn W., Rehm W.: Untersuchungen zur Core-Thermodynamik und zum Primärkreisverhalten des HTR-Modul bei schweren Kernaufheizstörfällen - Aktualisierung und Dokumentation der thermodynamischen Störfallanalysen, KFA interner Bericht KFA-ISR-IB-15/91, 1991
- [JEN1975] Jensen D. D., Haire M. J., Baldassare J. E., Hanson D. L.: Planning Grid for Validation of Fission Product Transport Codes, General Atomic, GA-AT(04-3)-167, 1975
- [JES1964] Jeschar R.: Analogie zwischen Wärme- und Stoffübergang in Schüttungen aus Kugeln, Archiv für das Eisenhüttenwesen, 35. Jahrgang, Heft 10 – Oktober 1964
- [JUE2011] Jühe S.: Kohlenstoffstaubfreisetzung bei Druckentlastungsereignissen von Hochtemperaturreaktoren, Dissertation an der RWTH-Aachen, Aachen, 2011
- [KAD2004] Kadak C. et. al.: Pebble Flow Experiments for Pebble Bed Reactors, 2nd International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology, Beijing, 2004
- [KAM2007] Kamrin K., Rycroft C., Bazant M.: The Stochastic Flow Rule: a Multi-scale Model for Granular Plasticity, MIT, Cambridge, 2007
- [KAS2012a] Kasselman St. et. al.: Status of the Development of a fully integrated Code System for the Simulation of High Temperature Reactor Cores, 6th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology (HTR2012), Tokyo, 2012
- [KAS2012b] Kasselman St., Schitthelm O.: Benutzerhandbuch zu TNT, Forschungszentrum Jülich, 2012 (in Bearbeitung)
- [KES2007] Keshaw J. B.: Reverse Engineering of GETTER – A Fission Product Release Code for PBMR, Doktorarbeit an der North-West University, Potchefstroom, 2007
- [KIM2004] Kim T. K. et. al.: Preliminary Assessment of Lattice Physics Capabilities for VHTR Analysis. Transaction of the American Nuclear Society 91, 2004
- [KIN2010] Kinzelbach W., Stauffer F.: Grundwasser 1 - Transport im Grundwasser, Unterlagen zur Vorlesung, 2010

- [KIS2009] Kissane M. P.: A Review of Radionuclide Behaviour in the Primary System of a Very-High-Temperature-Reactor, Nuclear Engineering and Design 239, 2009
- [KNI1993] Knizia K., Bäumer R.: Bau, Betrieb und Stilllegung des THTR 300, Erfahrungen und ihre Bedeutung für die weitere kerntechnische Entwicklung, in [SCH1993], Seiten 285-292
- [KRA1990] Kranz L.: Reduzierung der Nachwärme im Rechenprogramm THERMIX, Aktennotiz, Forschungszentrum Jülich, 7. Mai 1990
- [KRA1991] Kranz L.: Spaltprodukttransport im Hochtemperaturreaktor: Theorie, programmtechnische Umsetzung und Überprüfung an Experimenten, Dissertation an der RWTH-Aachen, Aachen, 1991
- [KRO1982] Krohn H.: Freisetzung von Spaltprodukten aus dem Core eines Kugelhaufenreaktors bei Störfällen mit Core Aufheizung, Juel-1791, Forschungszentrum Jülich, 1982
- [KRO1983] Krohn H., Finken R.: FRESCO-II - Ein Rechenprogramm zur Berechnung der Spaltproduktfreisetzung aus kugelförmigen HTR-Brennelementen in Bestrahlungs- und Ausheizexperimenten, Forschungszentrum Jülich, interner Bericht, 1983
- [KTA1978] N. N.: KTA 3102.1 Auslegung der Reaktorkerne von gasgekühlten Hochtemperaturreaktoren, Berechnung der Helium-Stoffwerte, Sicherheitstechnische Regel des KTA Regel, 1978
- [LEW1986] Lewis B. J.: Fission Product Release from Nuclear Fuel by Recoil and Knockout, Atomic Energy of Canada Limited, Ontario, 1986
- [LEP2007] Leppänen J.: Development of a New Monte Carlo Reactor Physics Code, D.Sc. Thesis, Helsinki University of Technology, 2007
- [LEY1995] Ley H.: Berechnung des Spaltprodukttransportes in SiC-beschichteten Brennelementen für Hochtemperaturreaktoren, Jül-3039, Forschungszentrum Jülich, 1995
- [LI2010] Li J., Nünighoff K., Pohl Ch., Allelein H.-J.: Investigating Spatial Self-Shielding and Temperature Effects for Homogeneous and Double Heterogeneous Pebble Models with MCNP, Journal of Spatial Science 55, 2010
- [LUE2000] Lü Y., Bülow M.: Analysis of Diffusion in Hollow Geometries, The BOC Group Gases Technology, Adsorption Science and Technology 6, p. 125-136, 2000
- [MAR2011] Martinez-Yubero S.: Analysis of the Pebble Flow Behaviour in Pebble Bed Reactors, Master thesis, RWTH-Aachen, 2011
- [MAT1991] Matke U. H.: Berechnung der Spaltproduktverteilung in Core und Primärkreislauf eines Hochtemperaturreaktors im Normalbetrieb, Jül-2515, Forschungszentrum Jülich, 1991
- [MAT2004] Matzner D.: PBMR Project Status and the Way Ahead, 2nd International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology, Beijing, 2004

- [MIN2011] Min-Hwan K.: CFD Analysis on the Influence of Coolant Distribution Blocks on the Core Hot Spot Temperature in a Prismatic Very High Temperature Reactor, ASME/JSME 2011 8th Thermal Engineering Joint Conference (AJTEC2011), Hawaii, 2011
- [MER2004] van der Merwe J. J.: Development and Validation of Fission Product Release Models and Software at PBMR, 2nd International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology, Beijing, China, 2004
- [MER2006] van der Merwe J. J.: Development of a Fission Product Release Model and its Application at PBMR, University of the North West, 2006
- [MER2009] van der Merwe J. J.: Modelling Silver Transport in Spherical HTR Fuel, Dissertation at the Univeristy of Pretoria, Pretoria, 2009
- [MIL2004] Miller G. K., Maki J. T., Knudson D. L., Petti D. A.: Current Capabilities of the Fuel Performance Modelling Code PARFUME, 2004
- [MOO1987] Moormann R., Verfondern K.: Methodik umfassender probabilistischer Sicherheitsanalysen für zukünftige HTR-Anlagenkonzepte - Ein Statusbericht (Stand 1986) Band 3: Spaltproduktfreisetzung, Forschungszentrum Jülich, 1987
- [MOR2012] Morris R.: AGR-1 Safety Testing Results, VHTR R&D FY12 Technical Review Meeting, May 22-24, Salt Lake City, 2012
- [MUE1976] Müller A.: Freisetzung gasförmiger Spaltprodukte (Kr, Xe, J) aus Brennelementen für gasgekühlte Hochtemperaturreaktoren, Jül-1295, Forschungszentrum Jülich, 1976
- [MUE1977] Müller A.: STADIF-II - ein Programm zur Berechnung der stationären Kühlgasaktivität in Kugelhaufen-HTR, Jül-1464, Forschungszentrum Jülich, 1977
- [MUT2000] Muto Y., Ishiyama S., Shiozawa S.: Study of Fission Product Release, Plate-out and Maintenance in Helium Turbo Machinery, IAEA Committee Meeting on Gas Turbine Power Conversion Systems for Modular HTGRs, Japan Atomic Energy Research Institute, Palo Alto, 14 16 November 2000
- [NAB2008] Nabelek H., Verfondern K., Kania M.: Fuel and Fission Products in the Jülich AVR Pebble Bed Reactor, 4th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology (HTR2008), Washington D.C., 2008
- [NIE2006] Niessen H. F.: PFC3D applied to the PBMR-400, Forschungszentrum Jülich, 2006
- [NIE2009] Niessen H. F.: PFC3D Validation with experimental results: AVR as a complex test and ANABEK, Forschungszentrum Jülich, 2009
- [NN1988] N. N.: The HTR-Module, A Modular High-Temperature Reactor as a Standardized Heat Source, Modern Power Systems, London, 1988

- [NN2003] N. N.: Evaluation of High Temperature Gas Cooled Reactor Performance: Benchmark Analysis Related to Initial Testing of the HTTR and HTR-10, IAEA-TECDOC-1382, Wien, 2003
- [NN2012] N. N.: <http://www.jaea.go.jp/JAEA/english/ff/ff43/randd01.html>, abgerufen am 6. Juni 2012
- [NN2012a] N. N.: <http://www.thtr.de/technik-sti.htm>, abgerufen am 1. Juli 2012
- [NOJ1998] Nojiri N. et. al.: Benchmark Problems' Data for the HTTR's Start-up Core Physics Experiments (Prepared for IAEA Coordinated Research Program), JAEA-memo 10-005, 1998
- [OEC2012a] OECD-NEA, The European Activation File (EAF-2007), <http://www.oecd-nea.org/dbdata/pubs/#eaf>, abgerufen am 20. Januar 2013
- [OEC2012b] OECD-NEA, Janis – Nuclear Data Display Program, <http://www.oecd-nea.org/janis/>, abgerufen am 20. Januar 2013
- [OKA] Okamoto F., Mikami H., Mitake S., Suzuki K.: The Study of Metallic Fission Product Release from the VHTR Core under Power Operating Condition, Fuji Electric Co. / JAEA, Japan, Datum der Publikation unbekannt
- [ORT2009] Ortensi J., Ougouag A. M.: Status Report on the Modelling of TRISO Energy Deposition, Time-Dependent Temperature Field and Doppler Feedback, Idaho National Laboratory, 2009
- [OUG2010] Ougouag A. M., Ferrer R. M.: Nodal Diffusion Burnable Poison Treatment for Prismatic Reactor Cores, 5th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology (HTR2010), Prague, 2010
- [PAS1978] Paschen H.: Konsequenzen des großtechnischen Einsatzes der Kernenergie in der Bundesrepublik Deutschland, Teil IV: Umweltauswirkungen von Kernkraftwerken und Anlagen des kerntechnischen Brennstoffkreislaufs, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1978
- [PET2012] Petti D.: Status of NGNP/AGR Fuel Development, VHTR R&D FY12 Technical Review Meeting, May 22-24, Salt Lake City, 2012
- [POH2009] Pohl P.: Investigations into the Pebble Flow Behaviour of the AVR High-Temperature Demonstration Reactor - A compilation of internal AVR Documents, AVR GmbH, internal report, Jülich, 2009
- [PRA1964] Prados J. W., Scott J. L.: Analysis of Stress and Strain in Spherical Shells of Pyrolytic Carbon, ORNL-3553, ORNL, 1964
- [PRO1983] Proksch E., Nabielek H., Strigl A.: Carbon Monoxide Formation in UO₂ Kernelled HTR Fuel Particles Containing Oxygen Getters, Forschungszentrum Seibersdorf, 1986

- [RAG1983] Ragos H.: Vorprojektuntersuchung einer HTR-Modul-Kraftwerksanlage, Technischer Bericht: Das Brennelement des HTR-Modul, Interatom, Bergisch Gladbach (Bensberg), 1983
- [RED1949] Redlich O., Kwong J. N. S.: Chemical Reviews Volume 44, 1949
- [REH1984] Rehm W., Jahn W., Verfondern K.: Zur passiven Nachwärmeabfuhr beim HTR mit dem Linerkühlsystem als Wärmesenke, Jül-1951, Forschungszentrum Jülich, 1984
- [ROE2001] Röllig K.: Rechenprogramm GETTER, Report No. GBRA 052 477, Westinghouse Reaktor GmbH, Mannheim, 2001
- [RON1999] Ronchi C., Sheindlin M., Musella M., Hyland G. J.: Thermal Conductivity of Uranium dioxide up to 2900 K from Simultaneous Measurement of the Heat Capacity and Thermal Diffusivity, Journal of Applied Physics, Volume 85, 1999
- [RUE2011] Rütten J.-H.: The Reactor-Simulation-Code V.S.O.P. - A Tool to Describe the Reactor Physics and to Simulate Fuel Cycles in Gas Cooled Fission Reactors, Forschungszentrum Jülich, 2011
- [RUE2012] Rütten H.-J., Haas K. A., Pohl C.: Computer Code System VSOP (99/11) , Jül-4326, Forschungszentrum Jülich, 2012
- [RUE2012b] Rütten H.-J.: persönliche Mitteilung, Januar 2012
- [SAI1991] Saito S., Tanaka T., Sudo Y.: Present Status of the High Temperature Engineering Test Reactor (HTTR), Nuclear Engineering and Design 132, S. 85-93, 1991
- [SCH1966] Schulten R.: Entstehungsgeschichte des AVR-Reaktors, in [AVR1966], zu "Die Inbetriebnahme hat begonnen", Seiten 218 und 219
- [SCH1974] Schwartz M. H., Sedgley D. B., Mendonca M. M.: SORS, Computer Programs for Analyzing Fission Product Release From HTGR Cores during Transient Temperature Excursions, General Atomics, GA-A12462, 1974
- [SCH1989a] Schulten R., Der AVR als neuer Beitrag zur Kernenergie, in [VDI1989], Seiten 27-35
- [SCH1989b] Schenk W., Nabielek H.: Kugelbrennelement mit TRISO-Partikeln bei Störfall-temperaturen, Jül-Spez-487, Forschungszentrum Jülich, 1989
- [SCH1989c] Scherer W.: Die zähe Flüssigkeit als Modell für das Kugelfließen in Hochtemperaturreaktoren, Jül-2331, Forschungszentrum Jülich, 1989
- [SCH1993] Kugeler K., Neis H., Ballensiefen G., Fortschritte in der Energietechnik – für eine wirtschaftliche, umweltschonende und schadensbegrenzende Energieversorgung, Prof. Dr. Rudolf Schulten zum 70. Geburtstag, Monographien des Forschungszentrum Jülich, Band 8, 1993, 603 Seiten

- [SEE2012] Seeger O. et. al.: Simulated Accident Testing of a Fuel Element from the HFR-EU1bis Irradiation Campaign, 6th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology (HTR2012), Tokyo, 2012
- [SEE2013] Seeger O.: persönliche Mitteilung, Juni 2013
- [SHI2004] Shi S. et. al.: Overview of HTTR design features, JAEA, Nuclear Engineering and Design 233, 2004
- [SHI2012] Shi, D.: The Process of Block-Type HTR Simulation with MGT-3D, interne Präsentation (Doktorandenseminar), Forschungszentrum Jülich / RWTH-Aachen, Mai 2012
- [SIE1987] N. N.: Aktivitätsfreisetzung und Strahlenexposition bei der HTR-Modul-Kraftwerksanlage Teil I: Bestimmungsgemäßer Betrieb, HTR-Modul Kraftwerk Konzeptbegutachtungsunterlagen, Band 4, Siemens Interatom, Bergisch-Gladbach (Bensberg), 1987
- [SIE1988a] N. N.: Aktivitätsfreisetzung und Strahlenexposition bei der HTR-Modul-Kraftwerksanlage Teil II: Störfälle, HTR-Modul Kraftwerk Konzeptbegutachtungsunterlagen, Band 4, Siemens Interatom, Bergisch-Gladbach (Bensberg), 1988
- [SIE1988b] N. N.: Hochtemperaturreaktor-Modul-Kraftwerksanlage, Kurzbeschreibung, Siemens-Interatom, Bergisch-Gladbach (Bensberg), 1988
- [SMI1974] Smith P.: An approximate Closed Form Solution to the Fission Product Diffusion Equation in One-Dimensional Slab Geometry, General Atomic, GA-A13196, 1974
- [TEU1992] Teuchert E., Rütten H.-J., Haas K. A.: Rechnerische Darstellung des HTR-Modul-Reaktors, KFA interner Bericht, Forschungszentrum Jülich, 1992
- [TIN1973] Tingate G. A.: Parameters Influencing the flow of Packings of Spheres in Cylindrical Vessels, Nuclear Engineering and Design 30, 1973
- [UHL1976] Uhlenbusch L.: Anwendung von Zwei-Phasen-Diffusion zur Beschreibung der Freisetzung von Caesium aus kugelförmigen HTR-Brennelementen, Jül-1323, Forschungszentrum Jülich, 1976
- [VDI1989] N. N.: AVR – 20 Jahre Betrieb, Ein Deutscher Beitrag zu einer zukunftsweisenden Energietechnik, Tagung: 17. und 18. Mai 1989, 22 Beiträge, 322 Seiten
- [VER1984] Verfondern K.: Numerische Untersuchung der 3-dimensionalen stationären Temperatur- und Strömungsverteilung im Core eines Kugelhaufenhochtemperaturreaktors, Juel-1826, Forschungszentrum Jülich, 1984
- [VER1985] Verfondern K.: PANAMA - Ein Rechenprogramm zur Vorhersage des Partikelbruchanteils von TRISO-Partikeln unter Störfallbedingungen, Forschungszentrum Jülich, 1985

- [VER1990] Verfondern K., Schenk W., Nabielek H.: Passive Safety Characteristics of Fuel for a Modular High-Temperature Reactor and Fuel Performance Modelling under Accident Conditions, Nuclear Technology and Design 91, 1990
- [VER1991] Verfondern K.: FRESCO-I Programm zur Berechnung der Spaltproduktfreisetzung aus dem Core eines Kugelhaufenreaktors bei Kernaufheizung - Benutzerhandbuch, Forschungszentrum Jülich, 1991
- [VER1993] Verfondern K., Müller D.: Methods and Data for HTGR Fuel Performance and Radionuclide Release Modelling during Normal Operation and Accidents for Safety Analysis, Forschungszentrum Jülich, 1993
- [VER2001] Verfondern K., Sumita J., Ueta S., Sawa K.: Modelling of Fuel Performance and Fission Product Release Behavior during HTTR Normal Operation, JAEA-Report no. 2000-067, 2001
- [VER2007] Verfondern K.: Status of German Spent HTGR Fuel Research, IAEA Technical Meeting on Safety Aspects of Modular HTGRs, Beijing, PR China, 23-26. Oktober 2007
- [VER2012] Verfondern K., Cao J., Liu T., Allelein H.-J.: Conclusions from V&V Studies on the German Codes PANAMA and FRESCO for HTGR Fuel Performance and Fission Product Release, 6th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology (HTR2012), Tokyo, 2012
- [VIL2008] Viljoen C. F. et. al.: The Re-Evaluation of the AVR Melt-Wire Experiment Using Modern Methods with Specific Focus on Bounding the Bypass Flow Effects, 4th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology (HTR2008) Washington DC, 2008
- [WAN2012] Y. Wang et. Al.: Improved Neutronics Treatment of Burnable Poisons for the Prismatic HTR, 6th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology (HTR2012), Tokyo, 2012
- [WNA2012] World Nuclear Association: World Nuclear Power Reactors & Uranium Requirements, <http://world-nuclear.org/info/reactors.html>, abgerufen am 15. September 2012
- [WU2002] Wu Z., Lin D., Zhong D.: The Design Features of the HTR-10, Nuclear Engineering and Design 218, 2002
- [XHO2012a] Xhonneux A., Kassermann St., Rütten H.-J., Becker K., Allelein H.-J.: Progress on the Development of a new Fuel Management Code to simulate the Movement of Pebble and Block Type Fuel Elements in a Very High Temperature Reactor Core, 6th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology (HTR2012), Tokyo, 2012

- [XHO2012b] Xhonneux A., Allelein H.-J.: Development of an Integrated Fission Product Release and Transport Code for Spatially Resolved Full-Core Calculations of V/HTRs, 6th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology (HTR2012), Tokyo, 2012
- [XHO2013] Xhonneux A., Das STACY-Geometriemodul - Beschreibung der Theorie und Nutzeranleitung, in Bearbeitung, 2013
- [XIA2010] Xiaowei L., Xiaotian L., Suyuan Y.: Nuclear Graphite Friction Properties and the Influence of Friction Properties on the Pebble Bed, Nuclear Engineering and Design 240, (2010)
- [YAN2009] Yang X., Jiang S.: Experimental Investigation on Feasibility of Two-Region-Designed Pebble-Bed HTGR, Journal of Nuclear Science and Technology 46, p. 374, 2009
- [ZHA2009] Zhang Z. et. al.: Current status and technical description of Chinese 2×250 MWth HTR-PM demonstration plant, Nuclear Engineering and Design, 2009
- [ZHE2009] Zhen Y., Shi L., Dong Y.: Thermohydraulic transient studies of the Chinese 200 MWe HTR-PM for loss of forced cooling accidents, Annals of Nuclear Engineering, 2009
- [ZIE1997] Ziermann E., Ivens G.: Abschlussbericht über den Leistungsbetrieb des AVR-Versuchskernkraftwerkes, Forschungszentrum Jülich / Technische Anlagenplanung Arbeitsgemeinschaft Versuchsreaktor (AVR) GmbH, Jül-3448, Jülich, 1997, 531 Seiten

Anhang

Anhang 1: Entstehungsprozesse für Iod-131 und relevante metallischen Spaltprodukt nuklide

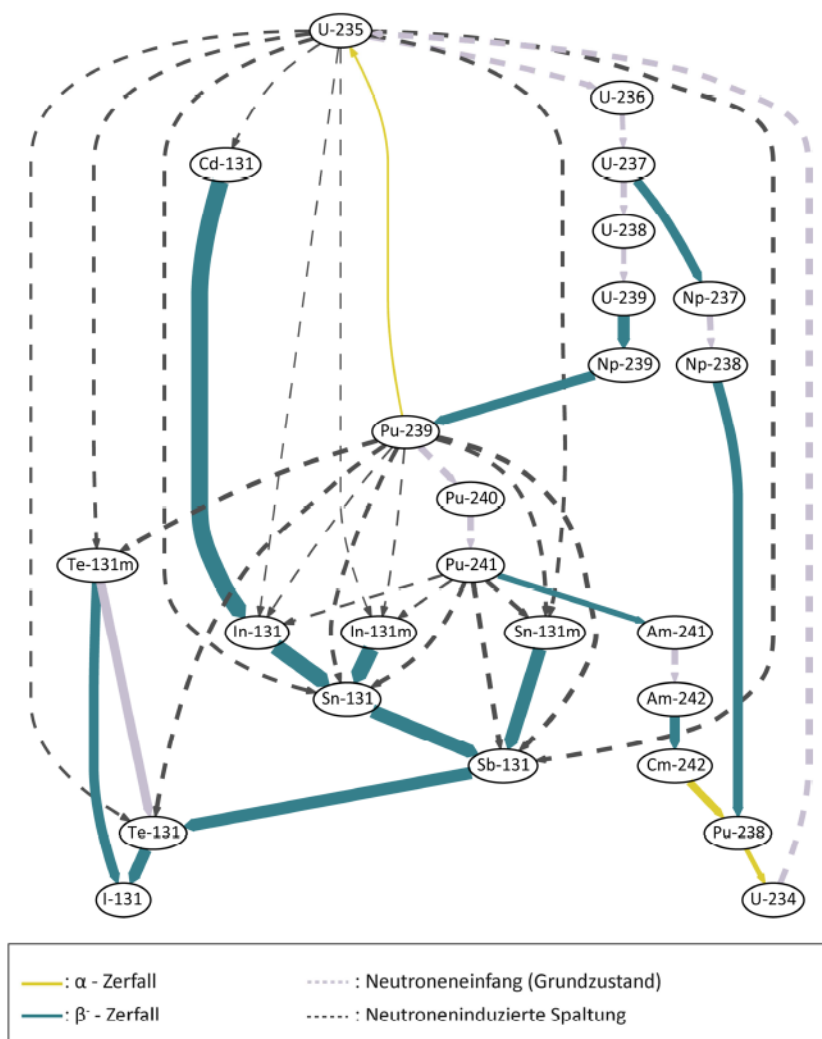


Abbildung A1.1: Entstehungsprozesse für I-131 (Prozesse mit einem prinzipiellen Beitrag, die Strichstärke entspricht dem relativen Beitrag zur Entstehung des Nuklids)

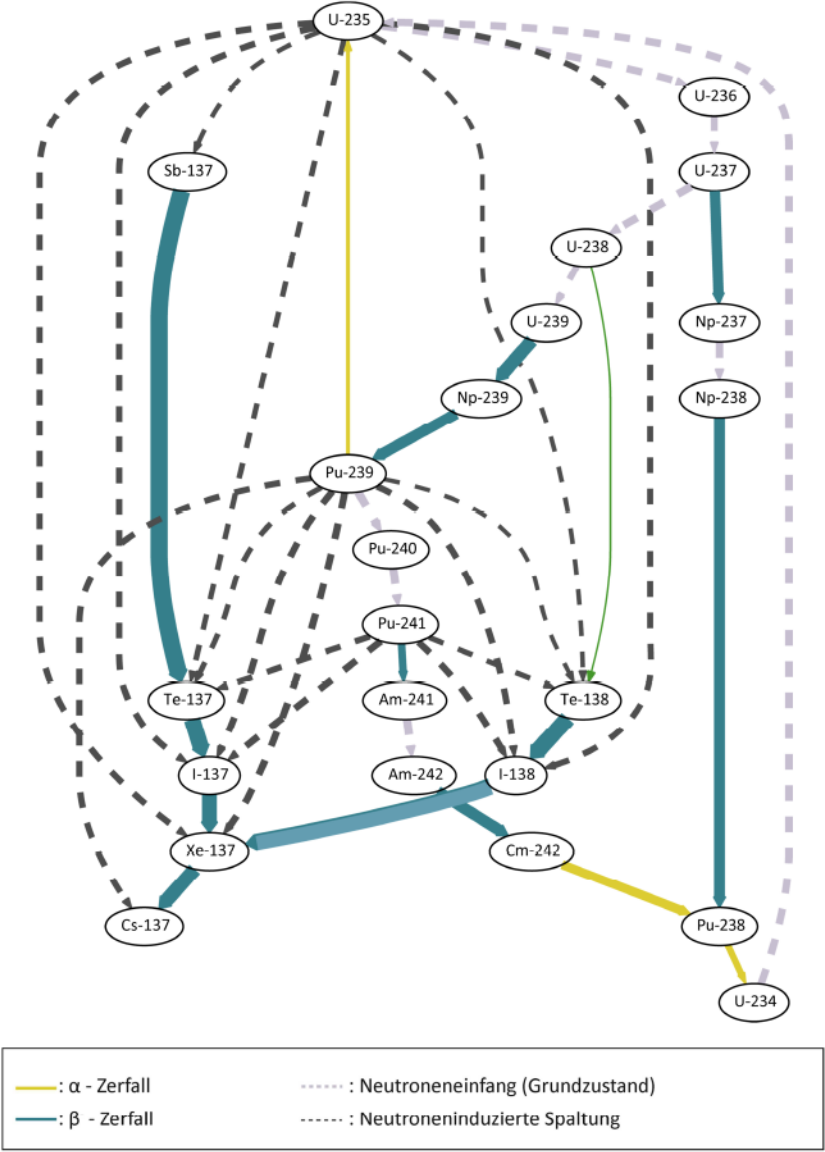


Abbildung A1.2: Entstehungsprozesse für Cs-137 (Prozesse mit einem prinzipiellen Beitrag, die Strichstärke entspricht dem relativen Beitrag zur Entstehung des Nuklids)

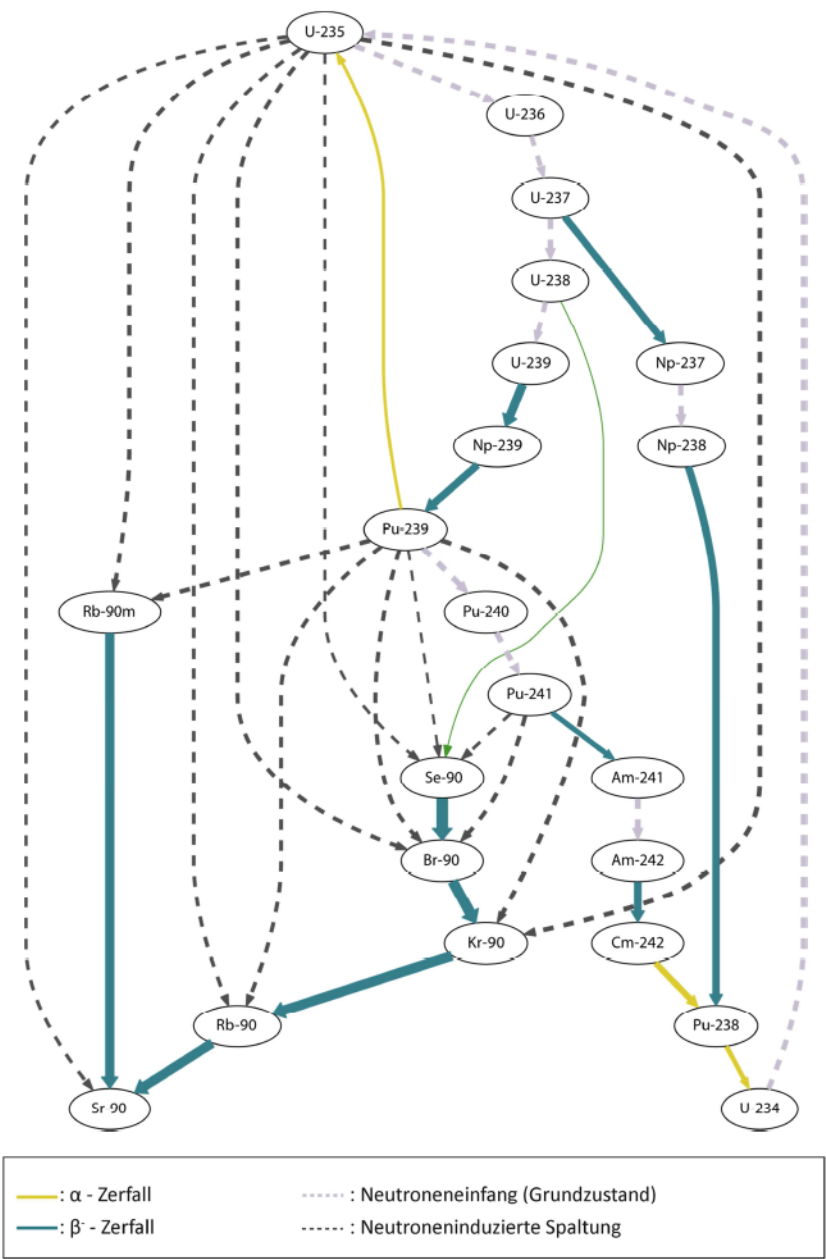


Abbildung A1.3: Entstehungsprozesse für Sr-90 (Prozesse mit einem prinzipiellen Beitrag, die Strichstärke entspricht dem relativen Beitrag zur Entstehung des Nuklids)

Anhang 2: Erweiterung der nuklearen Datenbibliothek

Die Reaktionen, die zur Bildung von metastabilen Nukliden führen, werden durch die ENDF/B-VII.0 nicht erfasst und bleiben in der Abbrandrechnung unberücksichtigt. Zur korrekten Beschreibung dieser Nuklide muss die bisher benutzte ENDF/B-VII.0-Bibliothek um die ACE-2007-Bibliothek [OEC2012a] erweitert werden. Diese Bibliothek verfügt über Unterbibliotheken für Neutron-, Proton- und Deuteron-induzierte Reaktionen und eine Unterbibliothek mit Zerfallsdaten [OEC2012a]. Diese Bibliothek muss allerdings durch den HCP-Library-Generator prozessiert werden, um in TNT genutzt werden zu können. Dies wäre mit einer umfangreichen Erweiterung des Generators verbunden. Übergangsweise wird im Rahmen dieser Arbeit die Entstehungsreaktion zur Bildung von Ag-110m manuell zu der in TNT benutzten Bibliothek hinzugefügt. Dieser Anhang fasst die Vorgehensweise zusammen. Das in Abbildung A2.1 dargestellte typische HTR-Spektrum in der MUPO-Energiegruppenstruktur wurde genutzt.

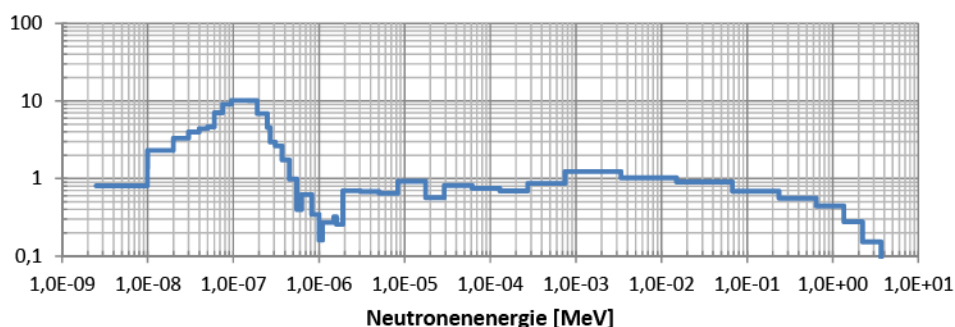


Abbildung A2.1: HTR-Spektrum in der MUPO-Energiegruppenstruktur

Der Wirkungsquerschnitt dieser Einfangsreaktion wurde der Datenbibliothek ACE-2007 entnommen und ist in Abbildung A2.2 dargestellt.

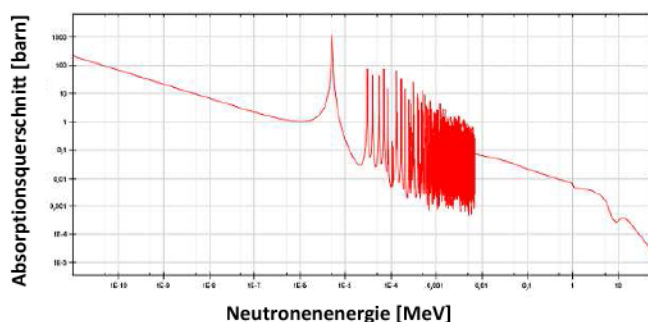


Abbildung A2.2: Einfangsquerschnitt von Ag-110m [OEC2012a]

Der Wirkungsquerschnittverlauf wurde mit Hilfe des Werkzeugs Janis 3.4 [OEC2012b] auf die MUPO-Energiegruppenstruktur kondensiert und anschließend der Bibliothek hinzugefügt. Die Wirksamkeit der Erweiterung der nuklearen Datenbibliothek wurde sowohl mit Messdaten als auch mit Simulationsergebnissen überprüft.

Vergleich TNT-Rechnung mit Siemens-Rechnung

Im ersten Schritt wird das mit TNT berechnete Gesamtinventar des HTR-Modul mit dem von Interatom berechneten Wert verglichen. Dazu wird das Ag-110m-Gesamtinventar des HTR-Modul-Gleichgewichtscore nach der VSOP-Vorgehensweise bestimmt, allerdings unter Anwendung von TNT anstelle von ORIGEN-Juel. Für jeden Fließkanal wird für jeden Coredurchlauf eine Abbrandrechnung mit dem Programm TNT durchgeführt. Am Ende eines jeden Durchlaufs werden die aus der Abbrandrechnung resultierenden Nuklidvektoren der verschiedenen Fließkanäle statistisch gemischt und erneut abgebrannt. In Abbildung A2.3 sind die zeitlichen Verläufe der Ag-110m-Inventare im inneren bzw. äußeren Fließkanal dargestellt. Das Inventar zu Beginn eines Durchlaufs ist für beide Kanäle aufgrund des Mischens am Ende eines Durchlaufs per Definition gleich.

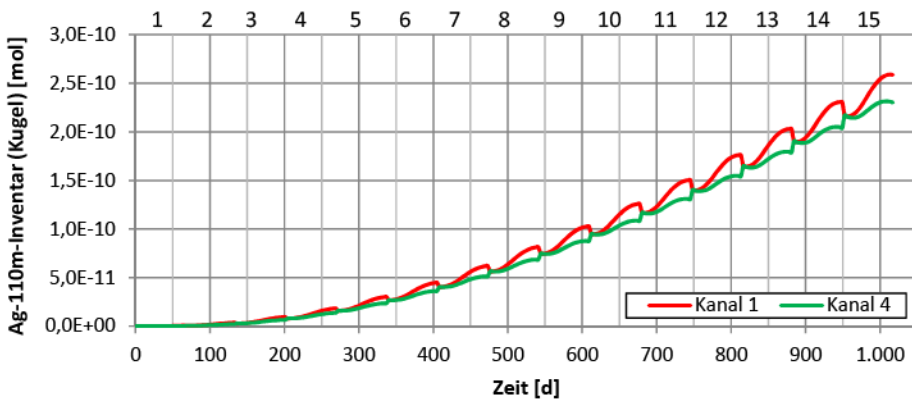


Abbildung A2.3: Ag-110m-Inventar pro Kugelbrennelement im innersten (Kanal 1) und äußersten Fließkanal (Kanal 4) des HTR-Modul in Abhängigkeit der Zeit (bzw. Durchlaufzahl)

Das Gesamtinventar des aktiven Cores wird durch Summation aller Batch-Inventare zu $9,59 \cdot 10^{-3}$ mol bestimmt. Im Rahmen der HTR-Modul-Sicherheitsstudie mittels Origen-Rechnung wurde ein Ag-110m-Inventar von $1,89 \cdot 10^{14}$ Bq ($9,76 \cdot 10^{-3}$ mol) für das Core bestimmt. Das Gesamtinventar wird demnach durch die TNT-Rechnungen sehr gut getroffen.

Vergleich TNT-Rechnung mit Messung

Zusätzlich zu der vorher gezeigten Verifikation werden die für einzelne Brennelemente mit TNT berechneten Ag-110m-Inventare mit Messwerten verglichen. Dazu wurden am ITU durchgeführte Inventarmessungen, die vor Beginn eines Heiztests durchgeführt wurden, herangezogen. Zur Nachrechnung der Bestrahlungsphase wurden die in [FUE2005a, FUE2005b, FUE2005c] aufgeführten mittleren Neutronenflüsse der verschiedenen Betriebszyklen herangezogen. Dabei hat jeder Betriebszyklus eine Länge von in etwa 25 Tagen. Während zwei Betriebszyklen war das Experiment nicht mit dem Reaktor verbunden bzw. war der Reaktor außer Betrieb.

Zwischen der Bestrahlungsphase im HFR in Petten und der Inventarmessung am ITU liegen 1.405 Tage. Aufgrund der geringen Halbwertszeit von I-131 ist dessen Inventar auf ein nicht messbares Niveau abgeklungen (siehe Abbildung A2.4). Für die anderen Nuklide (Sr-90, Cs-137, Ag-110m), die im Rahmen dieser Arbeit untersucht werden, konnte eine Inventarbestimmung durchgeführt werden. Abbildung A2.4 zeigt den Vergleich des mit TNT berechneten und des am ITU

gemessenen Ag-110m-Inventars. Der berechnete Wert weicht ungefähr um den Faktor vier vom Messwert ab.

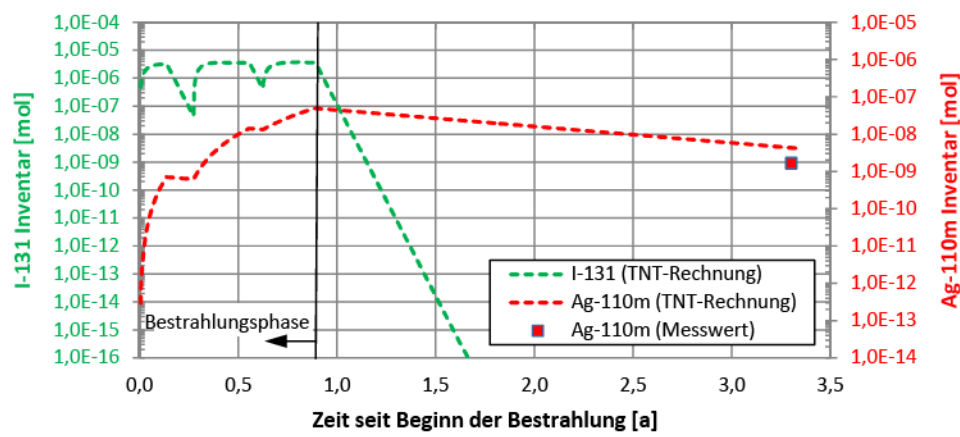


Abbildung A2.4: Silber-110m und Iod-131-Inventar im Falle des Brennelements HFR-EU1bis (Messwert für I-131 liegt aufgrund der kurzen Halbwertszeit nicht vor)

Tabelle A2.1 zeigt den Vergleich zwischen den mit TNT berechneten Werten und den am ITU gemessenen bzw. gerechneten Werten. Der Mittelwert aus den gemessenen bzw. berechneten Inventaren von zwei Brennelementen vom gleichen Typ (AVR GLE-4) wird herangezogen [FUE2008].

Tabelle A2.1: Vergleich von mit TNT berechneten Inventaren mit am ITU bestimmten Mess- und Rechenwerten (*: Messwerte (23.07.2008), **: Rechenwerte) [FRE2010]

Brennelement	Einheit	Sr-90 **	Ag-110m *	Cs-137 *
EU1bis3	[Bq]	$6,300 \cdot 10^{10}$	$3,730 \cdot 10^7$	$7,220 \cdot 10^{10}$
Eu1bis4	[Bq]	$6,260 \cdot 10^{10}$	$3,150 \cdot 10^7$	$7,180 \cdot 10^{10}$
Mittelwert	[Bq]	$6,280 \cdot 10^{10}$	$2,293 \cdot 10^7$	$7,200 \cdot 10^{10}$
EU1bis3	[mol]	$1,357 \cdot 10^{-4}$	$1,930 \cdot 10^{-9}$	$1,640 \cdot 10^{-4}$
Eu1bis4	[mol]	$1,348 \cdot 10^{-4}$	$1,630 \cdot 10^{-9}$	$1,635 \cdot 10^{-4}$
Mittelwert	[mol]	$1,352 \cdot 10^{-4}$	$1,186 \cdot 10^{-9}$	$1,640 \cdot 10^{-4}$
TNT-Rechenergebnis	[mol]	$1,310 \cdot 10^{-4}$	$4,150 \cdot 10^{-9}$	$1,800 \cdot 10^{-4}$
TNT-Rechenergebnis bezogen auf ITU-Messwert bzw. ITU-Rechnung		0,970	3,501	1,098

Ersichtlich wird, dass die Abweichung der TNT-Rechenergebnisse, bezogen auf Messwerte für die langlebigen Nuklide, im Vergleich zu der Abweichung bei Ag-110m deutlich geringer ist. Die Abweichung ist bei Ag-110m größer, weil die Querschnitte in der nuklearen Datenbibliothek für dieses Nuklid weniger präzise bekannt sind. Für eine Freisetzungsrechnung bei der eine Reihe von Unsicherheiten bestehen, ist dieses Ergebnis akzeptabel.

Anhang 3: Berechnung der Kr-85-Zerfälle bei der Nachzerfallsleistung

Laut [KRA1990] liegt der Leistungsanteil von Kr-85-Zerfällen an der gesamten Nachzerfallsleistung bei etwa 15 %. Des Weiteren wurde angenommen, dass dieser Leistungsanteil konstant ist. Mit Hilfe einer TNT-Rechnung wird dieser Wert am Beispiel eines HTR-Modul-Brennelements nachvollzogen. Die Rechenergebnisse sind in Abbildung A3.1 dargestellt. Die Abbildung zeigt, dass die durch Kr-85-Zerfälle bedingte Nachzerfallsleistung aufgrund der hohen Halbwertszeit des Nuklids von 10,76 Jahren für den hier betrachteten Zeitraum konstant ist. Die gesamte Nachzerfallsleistung klingt aber deutlich ab. Aus diesem Grund nimmt der Anteil aus Kr-85-Zerfällen stetig zu. Der Leistungsanteil liegt laut TNT-Rechnung über 200 Stunden unterhalb des Werts aus [KRA1990], danach wird der Wert überschritten.

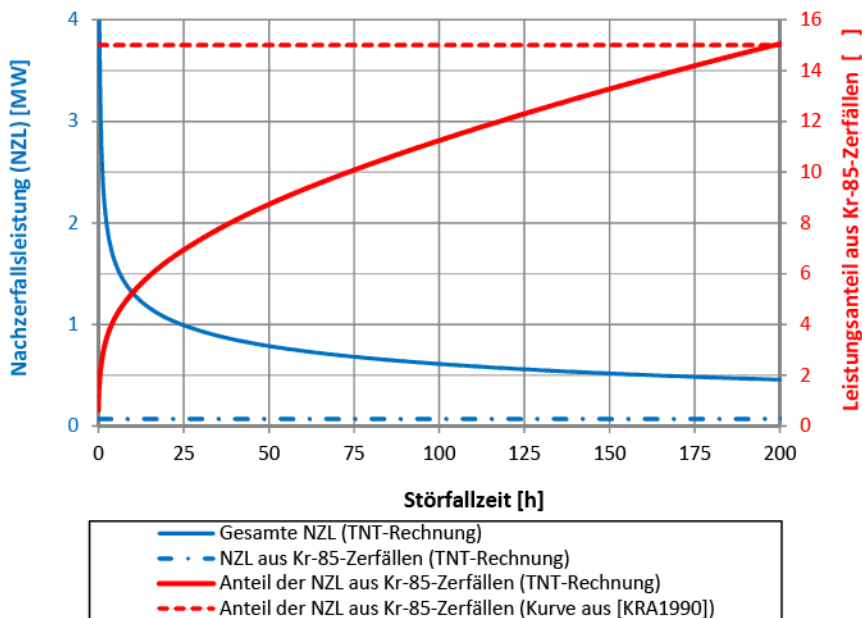


Abbildung A3.1: Gesamte Nachzerfallsleistung, Kr-85-zerfallsbedingte Nachzerfallsleistung und Anteil der Kr-85-zerfallsbedingte Nachzerfallsleistung in Abhängigkeit von der Zeit

Insgesamt kann somit gefolgert werden, dass der Anteil von Kr-85 an der Nachzerfallsleistung nach wenigen Stunden beträchtlich ist und damit eine Freisetzung von Kr-85 zu einer deutlichen Reduktion der gesamten Nachzerfallsleistung im Core führen würde.

Anhang 4: Einfluss des Grenzradius auf die Brennstofftemperaturen im HTR-Modul-Core

Um den Einfluss dieser Mittelwertbildung bei der Berechnung des Grenzradius in dem Algorithmus zur Berechnung des Brennelementtemperaturprofils auf die Brennstofftemperaturverteilung im Core zu untersuchen, wurden die beiden Extremfälle untersucht. Die Temperaturprofile im Brennstoff werden demnach bei einem Grenzradius gleich

$$r_{\text{Mittl}} = r_{\text{Mittl,arithm}} \quad \text{und} \quad r_{\text{Mittl}} = r_{\text{Mittl,geom}} \quad \text{A4.1}$$

berechnet. Die Temperaturprofile sind für den Referenzfall und die beiden anderen Fälle für ein Brennelement des HTR-Modul in Abbildung A4.1 dargestellt.

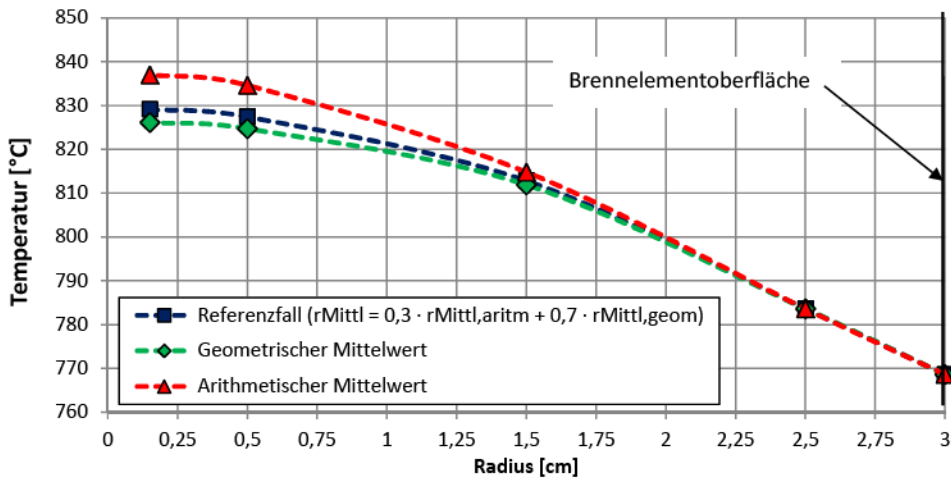


Abbildung A4.1: Temperaturverlauf in einem Brennelement des HTR-Moduls bei unterschiedlicher Festlegung des mittleren Radius (Grenzradius) in der Brennelementtemperaturprofilrechnung (Brennelement ist eingeteilt in 5 Zonen)

Die Temperatur an der Brennelementoberfläche ist per Definition in allen Fällen gleich, da diese die Randbedingung der Temperaturprofilrechnung ist. Mit abnehmendem Radius nimmt die Temperaturdifferenz zwischen den Rechnungen mit den unterschiedlichen Grenzradien zu. Im Brennelementzentrum beträgt die Differenz gegenüber dem Referenzfall 8°C bzw. -3°C für die Rechnung mit dem arithmetischen bzw. geometrischen Mittelwert.

Der Einfluss des Grenzradius auf das berechnete Temperaturprofil ist von der Wärmeleitfähigkeit und Leistung des betrachteten Brennelements abhängig. Aus diesem Grund wird eine Vergleichsrechnung für das gesamte aktive Core durchgeführt. Bei den Vergleichsrechnungen wird für jede Core-Masche und jede Batch ein radiales individuelles Temperaturprofil berechnet. Danach werden die Temperaturdifferenzen zwischen der Rechnung unter Anwendung des arithmetischen bzw. geometrischen Mittelwerts einerseits und der Rechnung unter Anwendung des kombinierten Grenzradius andererseits (Referenzrechnung), gebildet. Anschließend wird das Volumen der Brennelementzonen entsprechend der berechneten Temperaturdifferenz einer Klasse zugeschlagen. Der Volumenanteil einer Temperaturdifferenzklasse berechnet sich nach folgender Gleichung:

A4.2

$$f_{\Delta T_j} = \sum_i^{n_{\text{Maschen}}} \sum_k^{n_{\text{BE,Zonen}}} \begin{cases} (V_{\text{innen},k} + V_{\text{au\ss en},k}), & \Delta T_{U,j} \leq \Delta T_{i,k} < \Delta T_{O,j} \\ 0, & \Delta T_{i,k} < \Delta T_{U,j} \text{ oder } \Delta T_{O,j} < \Delta T_{i,k} \end{cases}$$

$f_{\Delta T_j}$	- Volumenanteil der Temperaturdifferenzklasse „j“	
$\Delta T_{U,j}$ bzw.	- untere bzw. oberer Grenze der Temperaturdifferenzklasse „j“	[°C]
$\Delta T_{O,j}$		
$\Delta T_{i,k}$	- Temperaturdifferenz der Brennelementzone „k“ in Core-Masche „i“	[°C]
n_{Maschen}	- Anzahl Maschen im Core	
$n_{\text{BE,Zonen}}$	- Anzahl Zonen bei der Berechnung des Temperaturprofils im Brennelement	
$V_{\text{innen},k}$ bzw.	- Volumen der inneren bzw. äußeren Schale einer Brennstoffelementzone „k“	[m ³]
$V_{\text{au\ss en},k}$		

In Abbildung A4.2 sind diese Temperaturdifferenzklassen dargestellt. Die Abbildung zeigt, dass bei dem arithmetischen Mittelwert bzw. bei dem geometrischen Mittelwert die Temperatur in jeder Brennelementzone niedriger bzw. höher ist im Vergleich zu der Referenzrechnung. Die Abbildung zeigt, dass unter Anwendung des geometrischen Mittelwerts 50 bzw. 90 des gesamten Brennstoffvolumens eine bis zu maximal 5 bzw. 9 °C höhere Temperatur aufweisen.

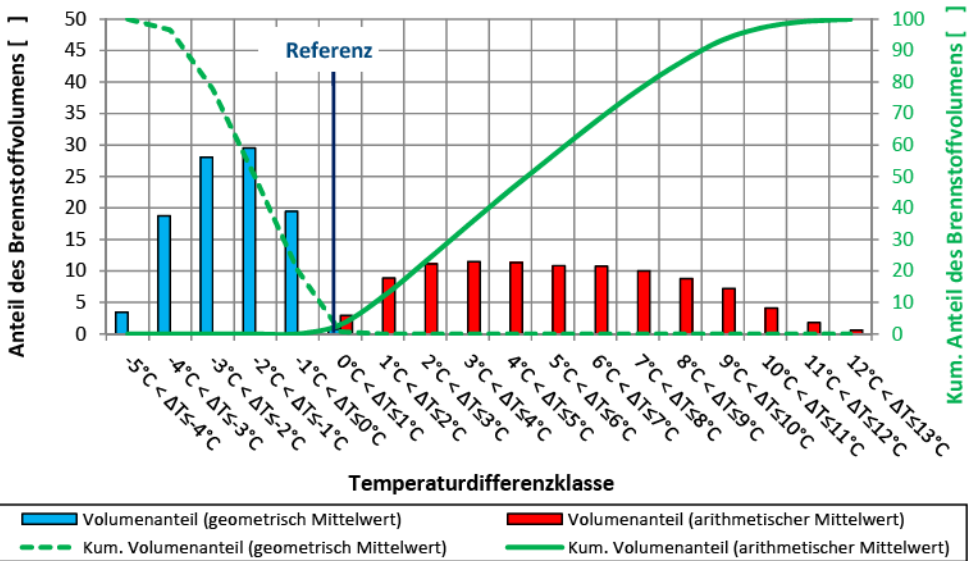


Abbildung A4.2: In Klassen eingeteilte Brennstofftemperaturdifferenzen zwischen der Rechnung mit dem arithmetischen bzw. geometrischen Mittelwerts als Grenzradius einerseits und der Referenzrechnung (gesamtes Brennstoffvolumen des HTR-Modul)

Ein kleiner Anteil des Brennstoffvolumens wird durch eine bis zu 13°C höhere Temperatur beaufschlagt. Bei einer Anwendung des geometrischen Mittelwerts sind die Temperaturdifferenzen kleiner. Die Maximale Temperaturdifferenz beträgt in diesem Fall -5°C. Die Temperaturdifferenzen sind insgesamt gering, sodass eine Auswirkung auf die Spaltproduktfreisetzungsrechnung vernachlässigbar ist. Eine detailliertere Analyse wäre jedoch empfehlenswert.

Anhang 5: Zusammensetzung der Cs-137-Bildungsrate

In Abbildung A5.1 ist die Zusammensetzung der Cs-137-Bildungsrate für ein Brennelement des HTR-Modul kumulativ dargestellt. Bei dieser Rechnung mit TNT (*Topological Nuclide Transmutation*) [KAS2012a] wurden die Zeiten außerhalb des Reaktorcores zwischen jeweils zwei Durchläufe vernachlässigt. Nur die 20 Isotope, die am Ende der Lebensdauer den größten Beitrag zur Entstehung von Cs-137 liefern, sind dargestellt. Insgesamt liefern 35 Isotope einen Beitrag. Die Abbildung A5.1 zeigt, dass Cs-137 über die gesamte Lebensdauer vornehmlich durch den β^- -Zerfall von Xenon-137 mit einer Halbwertszeit von 3,95 Minuten entsteht. Am Anfang der Brennelementlebensdauer bilden die Bildungsrate aus der Spaltung von U-235 und U-238 den zweit- bzw. dritthöchsten Anteil. Durch die steigende Ausnutzung des Brennstoffs und den gleichzeitigen Aufbau von Plutonium-Isotopen, die zunächst nicht im Brennelement vorhanden sind, nimmt deren Anteil mit der Zeit stark zu. Der Anteil durch Neutroneneinfang von Cs-136 ist vergleichsweise gering.

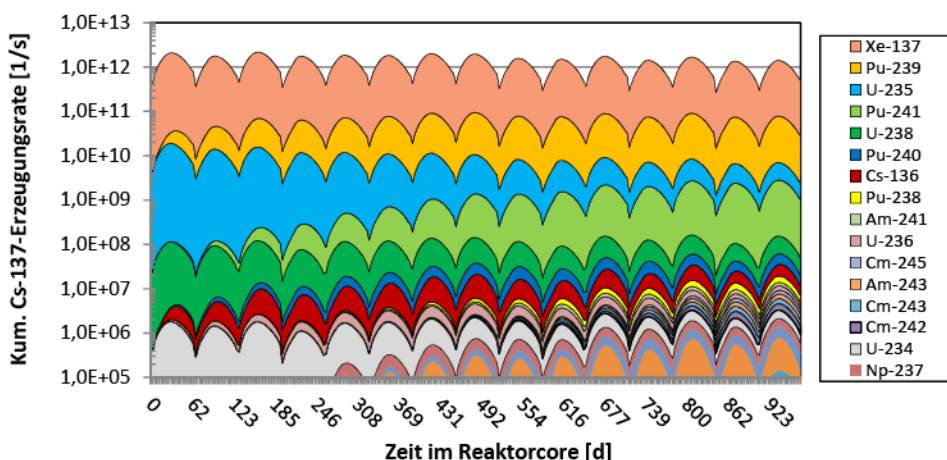


Abbildung A5.1: Beiträge zur Cs-137-Bildungsrate für ein Brennelement des HTR-Modul (15 Durchläufe, Simulation mit TNT, 20 größte Beiträge)

Im Rahmen dieser Arbeit werden nur Störfallszenarien betrachtet, bei denen die Reaktor(schnell)-Abschaltung erfolgreich verläuft. Nach der Abschaltung finden somit keine weiteren Spaltungen mehr statt. Wie allerdings vorher gezeigt wurde, wird Cs-137 vornehmlich durch den Zerfall von Xe-137 gebildet. Da das zu Störfallbeginn vorhandene Xe-137-Inventar jedoch weiterhin zerfällt, wird auch weiterhin Cs-137 gebildet. Aufgrund der hohen Zerfallsrate von Xe-137 nimmt die Bildungsrate von Cs-137 sehr stark mit der Zeit ab und ist nach ca. zwei Stunden nach Störfallbeginn praktisch vernachlässigbar.

Anhang 6: Schichtdickenverteilungen der einzelnen Schichten und der Verteilung des Partikeldurchmessers

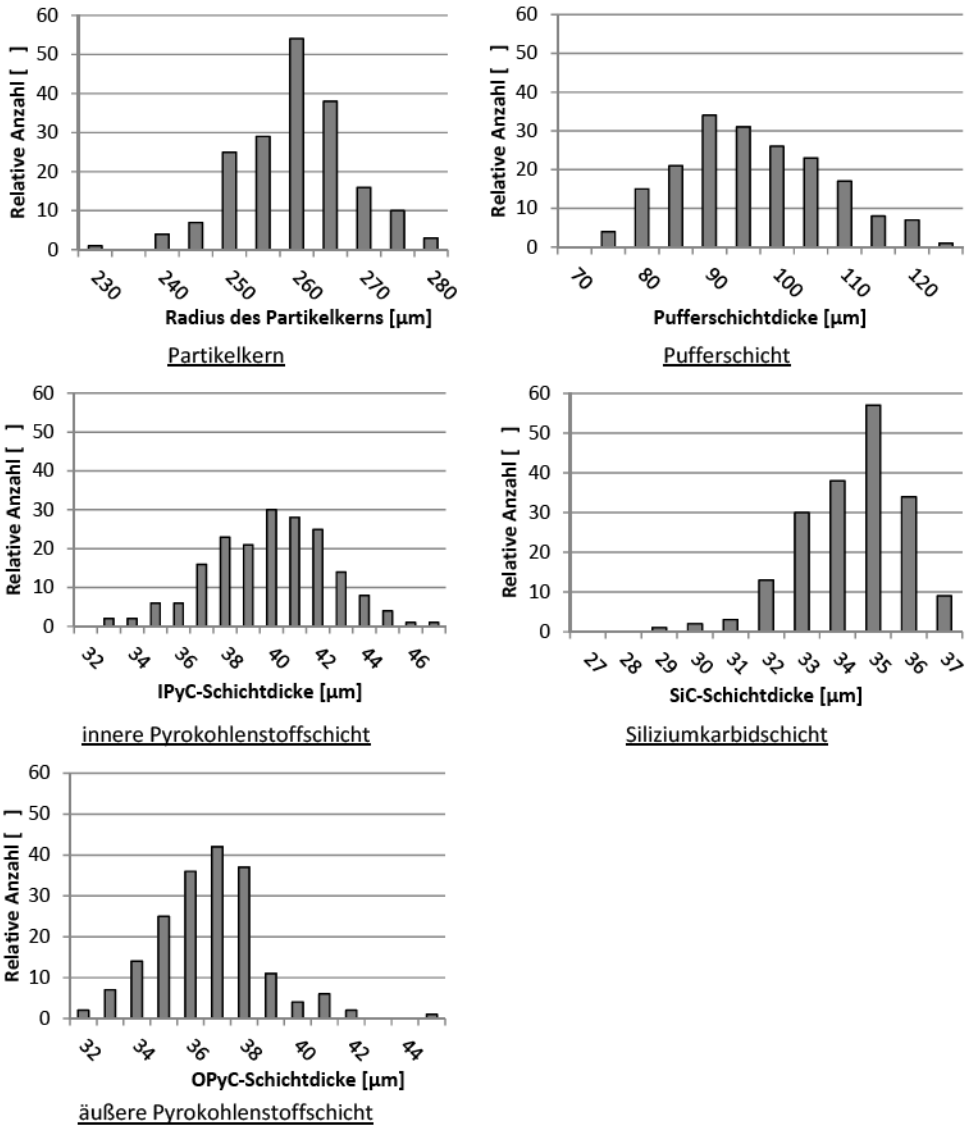


Abbildung A6.1: Am ORNL gemessene Einzelverteilungen [HUN2012] (eigene Darstellung)

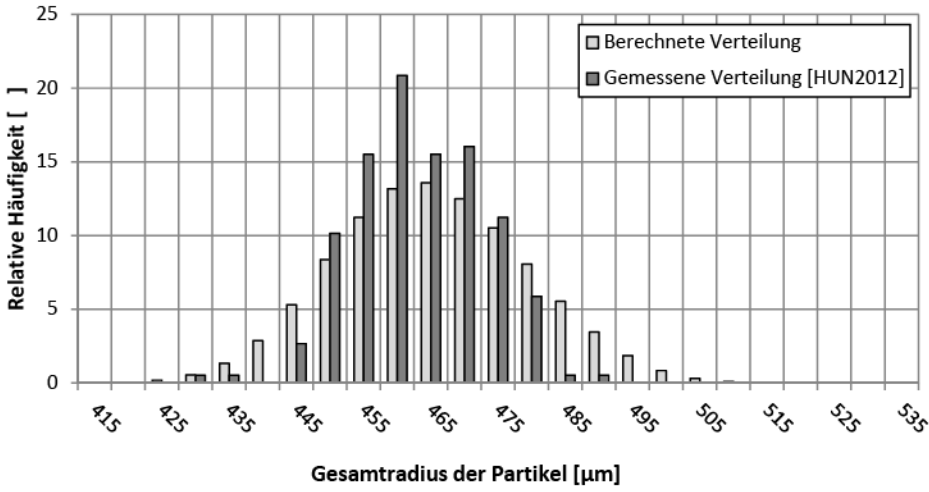


Abbildung A6.2: Vergleich der aus den Schichtdickenverteilungen der einzelnen Schichten berechneten Verteilung des Partikeldurchmessers im Vergleich zu der gemessenen Verteilung des Partikeldurchmessers

Anhang 7: Partikelhäufigkeiten, Partikelbruchanteile in der Klasse und Beitrag einer Klasse zu dem gesamten Partikelbruchanteil (Partikelkern und der Pufferschichtdicke)

		Häufigkeit eines Partikels																	Abw. [Anzahl · σ]
		Durchmesser des Partikelkerns [µm] (Nennmaß der Klasse)																	
		222,0	225,5	229,0	232,5	236,0	239,5	243,0	246,5	250,0	253,5	257,0	260,5	264,0	267,5	271,0	274,5	278,0	
Pufferschichtdicke (Nennmaß der Klasse) [µm]	43,0	8,1E-09	4,4E-08	2,2E-07	8,3E-07	2,5E-06	5,9E-06	1,3E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	-4,0
	49,5	4,4E-08	2,4E-07	1,2E-06	4,5E-06	1,4E-05	3,2E-05	5,9E-05	8,6E-05	9,7E-05	8,6E-05	5,9E-05	3,2E-05	1,4E-05	4,5E-06	1,2E-06	2,4E-07	4,4E-08	-3,5
	56,0	2,2E-07	1,2E-06	5,8E-06	2,2E-05	6,7E-05	1,6E-04	2,9E-04	4,2E-04	4,7E-04	4,2E-04	2,9E-04	1,6E-04	5,8E-05	2,2E-05	5,8E-06	1,2E-06	2,2E-07	-3,0
	62,5	8,3E-07	4,5E-06	2,2E-05	8,5E-05	2,6E-04	6,1E-04	1,1E-03	1,6E-03	1,8E-03	1,6E-03	1,1E-03	5,8E-04	2,2E-04	8,5E-05	2,2E-05	4,5E-06	8,3E-07	-2,5
	69,0	2,5E-06	1,4E-05	6,7E-05	2,6E-04	7,8E-04	1,8E-03	3,4E-03	4,9E-03	5,5E-03	4,9E-03	3,4E-03	1,8E-03	7,8E-04	2,6E-04	6,7E-05	1,4E-05	2,5E-06	-2,0
	75,5	6,9E-06	3,2E-05	1,6E-04	6,1E-04	1,8E-03	4,3E-03	7,9E-03	1,1E-02	1,3E-02	1,1E-02	7,9E-03	4,3E-03	1,8E-03	6,1E-04	1,6E-04	3,2E-05	6,9E-06	-1,5
	82,0	1,1E-05	5,9E-05	2,9E-04	1,1E-03	3,4E-03	7,9E-03	1,6E-02	2,1E-02	2,4E-02	2,1E-02	1,6E-02	7,9E-03	3,4E-03	2,9E-04	1,1E-03	2,9E-04	5,9E-05	-1,0
	88,5	1,6E-06	8,6E-05	4,2E-04	1,6E-03	4,9E-03	1,1E-02	2,1E-02	3,1E-02	3,4E-02	3,1E-02	2,1E-02	1,1E-02	4,9E-03	1,6E-03	4,2E-04	8,6E-05	1,6E-06	-0,5
	95,0	1,8E-05	9,7E-05	4,7E-04	1,9E-03	5,5E-03	1,3E-02	2,4E-02	3,4E-02	3,9E-02	3,4E-02	2,4E-02	1,3E-02	5,5E-03	1,9E-03	4,7E-04	9,7E-05	1,8E-05	0,0
	101,5	1,6E-05	6,6E-05	3,2E-04	1,1E-03	4,9E-03	1,1E-02	2,1E-02	3,1E-02	3,4E-02	3,1E-02	2,1E-02	1,1E-02	4,9E-03	1,6E-03	3,2E-04	6,6E-05	1,6E-05	0,5
	108,0	1,1E-05	5,9E-05	2,9E-04	1,1E-03	3,4E-03	7,9E-03	1,6E-02	2,1E-02	2,4E-02	2,1E-02	1,6E-02	7,9E-03	3,4E-03	2,9E-04	1,1E-03	2,9E-04	5,9E-05	1,0
	114,5	5,9E-06	3,2E-05	1,6E-04	6,1E-04	1,8E-03	4,3E-03	7,9E-03	1,1E-02	1,3E-02	1,1E-02	7,9E-03	4,3E-03	1,8E-03	6,1E-04	1,6E-04	3,2E-05	5,9E-06	1,5
121,0	2,5E-06	1,4E-05	6,7E-05	2,6E-04	7,8E-04	1,8E-03	3,4E-03	4,9E-03	5,5E-03	4,9E-03	3,4E-03	1,8E-03	7,8E-04	2,6E-04	6,7E-05	1,4E-05	2,5E-06	2,0	
127,5	6,9E-07	4,5E-06	2,2E-05	8,5E-05	2,6E-04	6,1E-04	1,1E-03	1,6E-03	1,8E-03	1,6E-03	1,1E-03	5,8E-04	2,2E-04	8,5E-05	2,2E-05	4,5E-06	6,9E-07	2,5	
134,0	2,2E-07	1,2E-06	5,8E-06	2,2E-05	6,7E-05	1,6E-04	2,9E-04	4,2E-04	4,7E-04	4,2E-04	2,9E-04	1,6E-04	5,8E-05	2,2E-05	5,8E-06	1,2E-06	2,2E-07	3,0	
140,5	8,1E-08	4,4E-08	2,2E-07	8,3E-07	2,5E-06	5,9E-06	1,3E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	8,1E-08	3,5	
147,0	1,1E-05	4,4E-06	2,2E-07	8,3E-07	2,5E-06	5,9E-06	1,3E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,8E-05	1,1E-05	4,0	
Abw. [Anzahl · σ]		-4	-3,5	-3	-2,5	-2	-1,5	-1	-0,5	0	0,5	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4	

		Partikelbruchanteil in der Klasse																	Abw. [Anzahl · σ]
		Durchmesser des Partikelkerns [µm] (Nennmaß der Klasse)																	
		222,0	225,5	229,0	232,5	236,0	239,5	243,0	246,5	250,0	253,5	257,0	260,5	264,0	267,5	271,0	274,5	278,0	
Pufferschichtdicke (Nennmaß der Klasse) [µm]	43,0	2,0E-04	2,3E-04	2,7E-04	3,1E-04	3,6E-04	4,2E-04	4,8E-04	5,5E-04	6,3E-04	7,2E-04	8,2E-04	9,4E-04	1,1E-03	1,2E-03	1,4E-03	1,6E-03	1,8E-03	-4
	49,5	9,4E-05	1,1E-04	1,3E-04	1,5E-04	1,7E-04	2,0E-04	2,3E-04	2,6E-04	3,0E-04	3,4E-04	3,9E-04	4,4E-04	5,0E-04	5,7E-04	6,6E-04	7,6E-04	8,7E-04	-3,5
	56,0	4,6E-05	5,6E-05	6,5E-05	7,5E-05	8,7E-05	1,0E-04	1,2E-04	1,3E-04	1,5E-04	1,7E-04	2,0E-04	2,3E-04	2,6E-04	2,9E-04	3,3E-04	3,8E-04	4,3E-04	-3
	62,5	2,6E-05	3,0E-05	3,5E-05	4,1E-05	4,7E-05	5,5E-05	6,3E-05	7,3E-05	8,3E-05	9,5E-05	1,1E-04	1,2E-04	1,4E-04	1,6E-04	1,8E-04	2,1E-04	2,4E-04	-2,5
	69,0	1,5E-05	1,8E-05	2,0E-05	2,4E-05	2,8E-05	3,2E-05	3,7E-05	4,2E-05	4,9E-05	5,6E-05	6,4E-05	7,3E-05	8,3E-05	9,4E-05	1,1E-04	1,2E-04	1,4E-04	-2
	75,5	9,1E-06	1,1E-05	1,2E-05	1,4E-05	1,7E-05	1,9E-05	2,2E-05	2,6E-05	3,0E-05	3,4E-05	3,9E-05	4,4E-05	5,1E-05	5,8E-05	6,6E-05	7,4E-05	8,4E-05	-1,5
	82,0	5,7E-06	6,7E-06	7,8E-06	9,1E-06	1,1E-05	1,2E-05	1,4E-05	1,6E-05	1,9E-05	2,1E-05	2,5E-05	2,8E-05	3,2E-05	3,7E-05	4,2E-05	4,7E-05	5,4E-05	-1
	88,5	3,7E-06	4,3E-06	5,1E-06	5,9E-06	6,8E-06	7,9E-06	9,2E-06	1,1E-05	1,2E-05	1,4E-05	1,6E-05	1,8E-05	2,1E-05	2,4E-05	2,7E-05	3,1E-05	3,6E-05	-0,5
	95,0	2,5E-06	2,9E-06	3,4E-06	3,9E-06	4,6E-06	5,3E-06	6,1E-06	7,1E-06	8,2E-06	9,4E-06	1,1E-05	1,2E-05	1,4E-05	1,6E-05	1,8E-05	2,1E-05	2,4E-05	0
	101,5	1,7E-06	2,0E-06	2,3E-06	2,7E-06	3,1E-06	3,6E-06	4,2E-06	4,9E-06	5,6E-06	6,5E-06	7,4E-06	8,5E-06	9,7E-06	1,1E-05	1,3E-05	1,4E-05	1,6E-05	0,5
108,0	1,1E-06	1,4E-06	1,6E-06	1,9E-06	2,2E-06	2,5E-06	3,0E-06	3,4E-06	3,9E-06	4,5E-06	5,2E-06	6,0E-06	6,9E-06	7,8E-06	8,9E-06	1,0E-05	1,2E-05	1	
114,5	6,4E-07	9,8E-07	1,1E-06	1,3E-06	1,6E-06	1,8E-06	2,1E-06	2,4E-06	2,8E-06	3,2E-06	3,7E-06	4,2E-06	4,9E-06	5,6E-06	6,4E-06	7,3E-06	8,3E-06	1,5	
121,0	5,0E-07	7,1E-07	8,3E-07	9,7E-07	1,1E-06	1,3E-06	1,5E-06	1,8E-06	2,0E-06	2,4E-06	2,7E-06	3,1E-06	3,6E-06	4,1E-06	4,7E-06	5,3E-06	6,1E-06	2	
127,5	4,4E-07	5,2E-07	6,1E-07	7,1E-07	8,3E-07	9,7E-07	1,1E-06	1,3E-06	1,5E-06	1,7E-06	2,0E-06	2,3E-06	2,6E-06	3,0E-06	3,5E-06	3,9E-06	4,5E-06	2,5	
134,0	3,3E-07	3,9E-07	4,5E-07	5,3E-07	6,2E-07	7,2E-07	8,4E-07	9,7E-07	1,1E-06	1,3E-06	1,5E-06	1,7E-06	2,0E-06	2,3E-06	2,6E-06	3,0E-06	3,4E-06	3	
140,5	2,5E-07	2,9E-07	3,4E-07	4,0E-07	4,7E-07	5,4E-07	6,3E-07	7,4E-07	8,5E-07	9,8E-07	1,1E-06	1,3E-06	1,5E-06	1,7E-06	2,0E-06	2,2E-06	2,6E-06	3,5	
147,0	1,9E-07	2,2E-07	2,6E-07	3,0E-07	3,5E-07	4,2E-07	4,8E-07	5,6E-07	6,5E-07	7,5E-07	8,7E-07	1,0E-06	1,1E-06	1,3E-06	1,5E-06	1,7E-06	2,0E-06	4	
Abw. [Anzahl · σ]		-4	-3,5	-3	-2,5	-2	-1,5	-1	-0,5	0	0,5	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4	

		Partikelbruchbeitrag = Häufigkeit · Partikelbruchanteil der Klasse																	Abw. [Anzahl · σ]
		Durchmesser des Partikelkerns [µm] (Nennmaß der Klasse)																	
Pufferschichtdicke [Nennmaß der Klasse] [µm]		222,0	225,5	229,0	232,5	236,0	239,5	243,0	246,5	250,0	253,5	257,0	260,5	264,0	267,5	271,0	274,5	278,0	
	43,0	1,6E-12	1,0E-11	5,8E-11	2,5E-10	9,1E-10	2,5E-09	5,2E-09	8,6E-09	1,1E-08	1,1E-08	8,9E-09	5,5E-09	2,7E-09	1,0E-09	3,0E-10	1,4E-11	1,4E-11	-4
	49,5	4,1E-12	2,6E-11	1,5E-10	6,0E-10	2,3E-09	6,3E-09	1,3E-08	2,2E-08	2,9E-08	2,9E-08	2,3E-08	1,4E-08	6,0E-09	2,6E-09	7,6E-10	1,9E-10	3,6E-11	-3,5
	56,0	1,0E-11	6,5E-11	3,7E-10	1,7E-09	5,8E-09	1,6E-08	3,3E-08	5,5E-08	7,2E-08	7,3E-08	5,8E-08	3,6E-08	1,7E-08	6,5E-09	1,9E-09	4,4E-10	9,2E-11	-3
	62,5	2,2E-11	1,4E-10	7,8E-10	3,8E-09	1,2E-08	3,9E-08	7,4E-08	1,2E-07	1,9E-07	1,9E-07	1,2E-07	7,6E-08	3,4E-08	1,4E-08	4,1E-09	1,0E-09	2,0E-10	-2,5
	69,0	8,8E-11	2,4E-10	1,4E-09	6,1E-09	2,1E-08	5,8E-08	1,3E-07	2,1E-07	2,7E-07	2,7E-07	2,1E-07	1,3E-07	6,4E-08	2,4E-08	7,2E-09	1,7E-09	3,5E-10	-2
	75,5	5,4E-11	3,4E-10	2,0E-09	8,7E-09	3,0E-08	8,3E-08	1,6E-07	2,9E-07	3,8E-07	3,9E-07	3,1E-07	1,9E-07	9,2E-08	3,5E-08	1,0E-08	2,4E-09	5,0E-10	-1,5
	82,0	3,2E-11	4,0E-10	2,3E-09	1,0E-08	3,5E-08	9,7E-08	2,1E-07	4,4E-07	5,8E-07	5,8E-07	4,4E-07	2,7E-07	1,1E-07	4,1E-08	1,2E-08	2,8E-09	5,8E-10	-1
	88,5	5,8E-11	3,7E-10	2,1E-09	9,5E-09	3,3E-08	9,1E-08	1,9E-07	3,8E-07	4,2E-07	4,3E-07	3,4E-07	2,1E-07	1,0E-07	3,9E-08	1,1E-08	2,7E-09	5,5E-10	-0,5
	95,0	4,4E-11	2,8E-10	1,5E-09	7,2E-09	2,5E-08	6,9E-08	1,5E-07	2,4E-07	3,2E-07	3,2E-07	2,4E-07	1,6E-07	7,8E-08	2,9E-08	8,7E-09	2,0E-09	4,2E-10	0
	101,5	2,7E-11	1,7E-10	9,7E-10	4,3E-09	1,5E-08	4,2E-08	8,9E-08	1,5E-07	1,9E-07	2,0E-07	1,6E-07	9,7E-08	4,7E-08	1,8E-08	6,3E-09	1,3E-09	2,6E-10	0,5
	108,0	1,2E-11	8,2E-11	4,7E-10	2,1E-09	7,4E-09	2,6E-08	4,3E-08	7,2E-08	9,9E-08	9,6E-08	7,6E-08	4,9E-08	2,3E-08	9,7E-09	2,6E-09	6,0E-10	1,3E-10	1
114,5	4,3E-12	3,2E-11	1,8E-10	8,1E-10	2,9E-09	7,0E-09	1,7E-08	2,8E-08	3,9E-08	3,7E-08	3,0E-08	1,8E-08	9,0E-09	3,5E-09	1,0E-09	2,3E-10	4,3E-11	1,5	
121,0	1,5E-12	9,7E-12	5,3E-11	2,5E-10	8,8E-10	2,9E-09	5,1E-09	8,6E-09	1,1E-08	1,1E-08	9,1E-09	5,7E-09	2,8E-09	1,1E-09	3,1E-10	7,3E-11	1,5E-11	2	
127,5	3,7E-13	2,4E-12	1,4E-11	6,1E-11	1,3E-10	5,4E-10	1,3E-09	2,6E-09	2,7E-09	2,8E-09	2,2E-09	1,4E-09	6,8E-10	2,6E-10	7,1E-11	1,8E-11	3,7E-12	2,5	
134,0	7,7E-14	4,9E-13	2,9E-12	1,2E-11	3,1E-11	1,1E-10	2,4E-10	5,1E-10	1,1E-09	1,2E-09	9,5E-10	4,9E-10	1,7E-09	1,2E-09	5,5E-10	1,5E-10	2,7E-11	3	
140,5	1,2E-14	7,0E-14	4,0E-13	1,6E-12	6,4E-12	1,6E-11	3,8E-11	6,3E-11	8,2E-11	8,4E-11	6,7E-11	4,2E-11	2,0E-11	7,8E-12	2,3E-11	5,4E-13	1,1E-13	3,5	
147,0	1,9E-15	9,7E-15	5,8E-14	2,3E-13	8,9E-13	2,8E-12	5,2E-12	8,8E-12	1,2E-11	1,2E-11	9,5E-12	5,9E-12	2,9E-12	1,2E-12	3,3E-13	7,6E-14	1,8E-14	4	
Abw. [Anzahl · σ]		-4	-3,5	-3	-2,5	-2	-1,5	-1	-0,5	0	0,5	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4	

Anhang 8: Partikelhäufigkeiten, Partikelbruchanteile in der Klasse und Beitrag einer Klasse zu dem gesamten Partikelbruchanteil (Partikelkern und der Siliziumkarbidschichtdicke)

		Häufigkeit eines Partikels																	Abw. (Anzahl-%)
		Durchmesser des Partikelkerns [µm] (Nennmaß der Klasse)																	
Dicke der SiC-Schicht (Nennmaß der Klasse) [µm]		222,0	225,5	229,0	232,5	236,0	239,5	243,0	246,5	250,0	253,5	257,0	260,5	264,0	267,5	271,0	274,5	278,0	
	18,0	8,1E-09	4,4E-08	2,1E-07	8,3E-07	2,5E-06	5,9E-06	1,1E-05	1,6E-05	1,8E-05	1,5E-05	9,9E-06	2,5E-06	8,3E-07	2,1E-07	4,4E-08	8,1E-09	-4,0	
	20,0	4,4E-08	2,1E-07	1,1E-06	4,5E-06	1,4E-05	3,2E-05	5,9E-05	8,6E-05	9,7E-05	8,6E-05	5,9E-05	3,2E-05	1,4E-05	4,5E-06	1,1E-06	4,4E-08	-3,5	
	22,0	2,1E-07	1,1E-06	5,9E-06	2,1E-05	6,7E-05	1,6E-04	2,9E-04	4,7E-04	4,7E-04	3,9E-04	1,6E-04	6,7E-05	2,1E-05	5,9E-06	1,1E-06	2,1E-07	-3,0	
	24,0	8,3E-07	4,5E-06	2,1E-05	6,7E-05	2,6E-04	6,1E-04	1,1E-03	1,6E-03	1,8E-03	1,6E-03	1,1E-03	6,7E-04	2,1E-04	5,9E-05	1,1E-05	2,1E-06	-2,5	
	26,0	2,5E-06	1,4E-05	6,7E-05	2,6E-04	7,8E-04	1,8E-03	3,4E-03	4,9E-03	5,9E-03	4,9E-03	3,4E-03	1,8E-03	7,8E-04	2,6E-04	6,7E-05	1,4E-05	-2,0	
	28,0	5,9E-06	3,2E-05	1,6E-04	6,1E-04	1,8E-03	4,3E-03	7,9E-03	1,1E-02	1,3E-02	1,1E-02	7,9E-03	4,3E-03	1,8E-03	6,1E-04	1,6E-04	3,2E-05	-1,5	
	30,0	1,1E-05	5,9E-05	2,9E-04	1,1E-03	3,4E-03	7,9E-03	1,5E-02	2,1E-02	2,4E-02	2,1E-02	1,5E-02	7,9E-03	3,4E-03	1,1E-03	2,9E-04	5,9E-05	-1,0	
	32,0	1,6E-05	8,6E-05	4,2E-04	1,6E-03	4,9E-03	1,1E-02	2,1E-02	2,1E-02	2,4E-02	2,1E-02	1,5E-02	7,9E-03	3,4E-03	1,1E-03	2,9E-04	5,9E-05	-0,5	
	34,0	1,8E-05	9,7E-05	4,7E-04	1,8E-03	5,5E-03	1,3E-02	2,4E-02	2,4E-02	2,9E-02	2,4E-02	1,6E-02	8,6E-03	3,2E-03	1,1E-03	2,9E-04	5,9E-05	0,0	
	36,0	1,6E-05	8,6E-05	4,2E-04	1,6E-03	4,9E-03	1,1E-02	2,1E-02	2,1E-02	2,4E-02	2,1E-02	1,5E-02	7,9E-03	3,4E-03	1,1E-03	2,9E-04	5,9E-05	0,5	
	38,0	1,1E-05	5,9E-05	2,9E-04	1,1E-03	3,4E-03	7,9E-03	1,5E-02	2,1E-02	2,4E-02	2,1E-02	1,5E-02	7,9E-03	3,4E-03	1,1E-03	2,9E-04	5,9E-05	1,0	
40,0	5,9E-06	3,2E-05	1,6E-04	6,1E-04	1,8E-03	4,3E-03	7,9E-03	1,1E-02	1,3E-02	1,1E-02	7,9E-03	4,3E-03	1,8E-03	6,1E-04	1,6E-04	3,2E-05	1,5		
42,0	2,5E-06	1,4E-05	6,7E-05	2,6E-04	7,8E-04	1,8E-03	3,4E-03	4,9E-03	5,9E-03	4,9E-03	3,4E-03	1,8E-03	7,8E-04	2,6E-04	6,7E-05	1,4E-05	2,0		
44,0	8,3E-07	4,5E-06	2,1E-05	6,7E-05	2,6E-04	6,1E-04	1,1E-03	1,6E-03	1,8E-03	1,6E-03	1,1E-03	6,7E-04	2,1E-04	5,9E-05	1,1E-05	2,1E-06	2,5		
46,0	2,1E-07	1,1E-06	5,9E-06	2,1E-05	6,7E-05	1,6E-04	2,9E-04	4,7E-04	4,7E-04	3,9E-04	1,6E-04	6,7E-05	2,1E-05	5,9E-06	1,1E-06	2,1E-07	3,0		
48,0	4,4E-08	2,1E-07	1,1E-06	4,5E-06	1,4E-05	3,2E-05	5,9E-05	8,6E-05	9,7E-05	8,6E-05	5,9E-05	3,2E-05	1,4E-05	4,5E-06	1,1E-06	2,1E-07	3,5		
50,0	8,1E-09	4,4E-08	2,1E-07	8,3E-07	2,5E-06	5,9E-06	1,1E-05	1,6E-05	1,8E-05	1,5E-05	9,9E-06	2,5E-06	8,3E-07	2,1E-07	4,4E-08	8,1E-09	4,0		
Abw. (Anzahl-%)		-4	-3,5	-3	-2,5	-2	-1,5	-1	-0,5	0	0,5	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4	

		Partikelbruchanteil in der Klasse																	Abw. (Anzahl-%)
		Durchmesser des Partikelkerns [µm] (Nennmaß der Klasse)																	
		222,0	225,5	229,0	232,5	236,0	239,5	243,0	246,5	250,0	253,5	257,0	260,5	264,0	267,5	271,0	274,5	278,0	
Dicke der SiC-Schicht (Nennmaß der Klasse) [µm]	18,0	8,9E-06	1,0E-05	1,2E-05	1,4E-05	1,6E-05	1,9E-05	2,2E-05	2,5E-05	2,9E-05	3,4E-05	3,9E-05	4,4E-05	5,1E-05	5,8E-05	6,6E-05	7,5E-05	8,6E-05	-4
	20,0	7,4E-06	8,7E-06	1,0E-05	1,2E-05	1,4E-05	1,6E-05	1,8E-05	2,1E-05	2,4E-05	2,8E-05	3,2E-05	3,7E-05	4,2E-05	4,9E-05	5,5E-05	6,3E-05	7,1E-05	-3,5
	22,0	6,1E-06	7,3E-06	8,5E-06	9,9E-06	1,2E-05	1,3E-05	1,5E-05	1,8E-05	2,1E-05	2,4E-05	2,7E-05	3,1E-05	3,6E-05	4,1E-05	4,6E-05	5,3E-05	6,0E-05	-3
	24,0	5,2E-06	6,2E-06	7,2E-06	8,4E-06	9,8E-06	1,1E-05	1,3E-05	1,5E-05	1,7E-05	2,0E-05	2,3E-05	2,6E-05	3,0E-05	3,4E-05	3,9E-05	4,5E-05	5,1E-05	-2,5
	26,0	4,5E-06	5,2E-06	6,1E-06	7,1E-06	8,3E-06	9,6E-06	1,1E-05	1,3E-05	1,5E-05	1,7E-05	2,0E-05	2,2E-05	2,6E-05	2,9E-05	3,3E-05	3,8E-05	4,3E-05	-2
	28,0	3,8E-06	4,5E-06	5,2E-06	6,1E-06	7,1E-06	8,3E-06	9,5E-06	1,1E-05	1,3E-05	1,5E-05	1,7E-05	1,9E-05	2,3E-05	2,5E-05	2,9E-05	3,2E-05	3,7E-05	-1,5
	30,0	3,3E-06	3,9E-06	4,5E-06	5,3E-06	6,1E-06	7,1E-06	8,2E-06	9,5E-06	1,1E-05	1,3E-05	1,4E-05	1,6E-05	1,9E-05	2,2E-05	2,5E-05	2,8E-05	3,2E-05	-1
	32,0	2,8E-06	3,3E-06	3,9E-06	4,5E-06	5,3E-06	6,1E-06	7,1E-06	8,2E-06	9,4E-06	1,1E-05	1,2E-05	1,4E-05	1,6E-05	1,9E-05	2,2E-05	2,4E-05	2,7E-05	-0,5
	34,0	2,5E-06	2,9E-06	3,4E-06	3,9E-06	4,6E-06	5,3E-06	6,1E-06	7,1E-06	8,2E-06	9,4E-06	1,1E-05	1,2E-05	1,4E-05	1,6E-05	1,8E-05	2,1E-05	2,4E-05	0
	36,0	2,2E-06	2,5E-06	2,9E-06	3,4E-06	4,0E-06	4,6E-06	5,3E-06	6,2E-06	7,1E-06	8,2E-06	9,4E-06	1,1E-05	1,2E-05	1,4E-05	1,6E-05	1,8E-05	2,1E-05	0,5
	38,0	1,9E-06	2,2E-06	2,6E-06	3,0E-06	3,5E-06	4,0E-06	4,7E-06	5,4E-06	6,2E-06	7,2E-06	8,2E-06	9,4E-06	1,1E-05	1,2E-05	1,4E-05	1,6E-05	1,8E-05	1
	40,0	1,7E-06	1,9E-06	2,2E-06	2,6E-06	3,1E-06	3,6E-06	4,1E-06	4,7E-06	5,5E-06	6,3E-06	7,2E-06	8,2E-06	9,4E-06	1,1E-05	1,2E-05	1,4E-05	1,6E-05	1,5
42,0	1,5E-06	1,7E-06	2,0E-06	2,3E-06	2,7E-06	3,1E-06	3,6E-06	4,2E-06	4,8E-06	5,5E-06	6,3E-06	7,2E-06	8,3E-06	9,5E-06	1,1E-05	1,2E-05	1,4E-05	2	
44,0	1,3E-06	1,5E-06	1,8E-06	2,1E-06	2,4E-06	2,8E-06	3,2E-06	3,7E-06	4,3E-06	4,9E-06	5,6E-06	6,4E-06	7,3E-06	8,4E-06	9,5E-06	1,1E-05	1,2E-05	2,5	
46,0	1,1E-06	1,3E-06	1,6E-06	1,9E-06	2,2E-06	2,5E-06	2,9E-06	3,3E-06	3,8E-06	4,3E-06	5,0E-06	5,7E-06	6,5E-06	7,4E-06	8,5E-06	9,6E-06	1,1E-05	3	
48,0	1,0E-06	1,2E-06	1,4E-06	1,6E-06	1,9E-06	2,2E-06	2,5E-06	2,9E-06	3,4E-06	3,9E-06	4,4E-06	5,1E-06	5,8E-06	6,6E-06	7,5E-06	8,5E-06	9,7E-06	3,5	
50,0	9,1E-07	1,1E-06	1,2E-06	1,4E-06	1,7E-06	1,9E-06	2,2E-06	2,6E-06	3,0E-06	3,4E-06	3,9E-06	4,5E-06	5,2E-06	5,9E-06	6,7E-06	7,8E-06	8,7E-06	4	
Abw. (Anzahl-%)		-4	-3,5	-3	-2,5	-2	-1,5	-1	-0,5	0	0,5	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4	

		Partikelbruchbeitrag = Häufigkeit · Partikelbruchanteil der Klasse																	Abw. (Anzahl-%)
		Durchmesser des Partikelkerns [µm] (Nennmaß der Klasse)																	
Dicke der SiC-Schicht (Nennmaß der Klasse) [µm]		222,0	225,5	229,0	232,5	236,0	239,5	243,0	246,5	250,0	253,5	257,0	260,5	264,0	267,5	271,0	274,5	278,0	
	18,0	7,2E-14	4,6E-13	2,6E-12	1,2E-11	4,1E-11	1,1E-10	2,4E-10	4,0E-10	5,3E-10	5,3E-10	4,2E-10	2,6E-10	1,3E-10	4,6E-11	1,4E-11	3,3E-12	6,9E-13	
	20,0	3,2E-13	2,1E-12	1,2E-11	5,3E-11	1,9E-10	5,1E-10	1,1E-09	1,6E-09	2,4E-09	2,4E-09	1,9E-09	1,2E-09	5,9E-10	2,2E-10	6,5E-11	1,5E-11	3,2E-12	
	22,0	1,3E-12	8,6E-12	4,9E-11	2,2E-10	7,7E-10	2,1E-09	4,5E-09	7,5E-09	9,8E-09	9,9E-09	7,9E-09	4,9E-09	2,4E-09	9,0E-10	2,7E-10	6,2E-11	1,3E-11	
	24,0	4,4E-12	2,8E-11	1,5E-10	7,2E-10	2,5E-09	9,9E-09	1,9E-08	3,2E-08	5,2E-08	6,3E-08	5,2E-08	3,2E-08	1,6E-08	7,8E-09	2,3E-09	5,4E-10	1,2E-11	
	26,0	1,1E-11	7,2E-11	4,1E-10	1,8E-09	6,4E-09	1,8E-08	3,8E-08	6,3E-08	8,3E-08	8,3E-08	6,6E-08	4,1E-08	2,0E-08	7,5E-09	2,2E-09	5,2E-10	1,1E-11	
	28,0	2,3E-11	1,4E-10	8,3E-10	3,7E-09	1,3E-08	3,5E-08	7,6E-08	1,2E-07	1,6E-07	1,7E-07	1,3E-07	8,3E-08	4,0E-08	1,5E-08	4,5E-09	1,0E-09	2,2E-11	
	30,0	3,6E-11	2,3E-10	1,3E-09	5,9E-09	2,1E-08	5,6E-08	1,2E-07	2,0E-07	2,6E-07	2,7E-07	2,1E-07	1,3E-07	6,0E-08	2,4E-08	7,1E-09	1,7E-09	3,4E-11	
	32,0	4,5E-11	2,9E-10	1,8E-09	7,3E-09	2,6E-08	7,0E-08	1,5E-07	2,5E-07	3,2E-07	3,3E-07	2,6E-07	1,6E-07	7,9E-08	3,0E-08	8,9E-09	2,1E-09	4,3E-11	
	34,0	4,4E-11	2,8E-10	1,8E-09	7,2E-09	2,5E-08	6,9E-08	1,5E-07	2,4E-07	3,2E-07	3,2E-07	2,6E-07	1,6E-07	7,8E-08	2,9E-08	8,7E-09	2,0E-09	4,2E-11	
	36,0	3,4E-11	2,2E-10	1,3E-09	5,5E-09	1,9E-08	5,3E-08	1,1E-07	1,9E-07	2,5E-07	2,5E-07	2,0E-07	1,2E-07	6,0E-08	2,3E-08	6,7E-09	1,6E-09	3,2E-11	
	38,0	2,1E-11	1,3E-10	7,5E-10	3,4E-09	1,2E-09	3,2E-09	6,8E-09	1,1E-07	1,5E-07	1,5E-07	1,2E-07	7,5E-08	3,6E-08	1,4E-08	4,1E-09	1,1E-09	2,4E-11	
40,0	9,8E-12	6,2E-11	3,0E-10	1,0E-09	3,6E-09	1,0E-08	3,3E-08	5,4E-08	7,1E-08	7,2E-08	5,7E-08	3,5E-08	1,7E-08	6,5E-09	1,9E-09	4,3E-10	9,3E-11		
42,0	3,7E-12	2,3E-11	1,3E-10	6,0E-10	2,1E-09	5,7E-09	1,2E-08	2,0E-08	2,8E-08	2,7E-08	2,1E-08	1,3E-08	6,4E-09	2,4E-09	7,2E-10	1,7E-10	3,5E-11		
44,0	1,1E-11	6,8E-12	3,9E-11	1,8E-10	6,1E-10	1,7E-09	3,6E-09	6,0E-09	7,6E-09	7,9E-09	6,3E-09	3,9E-09	1,9E-09	7,2E-10	2,1E-10	4,9E-11	1,0E-11		
46,0	2,5E-12	1,6E-12	9,6E-12	4,0E-11	1,4E-10	3,9E-10	8,2E-10	1,4E-09	1,8E-09	1,8E-09	1,4E-09	9,0E-10	4,3E-10	1,6E-10	4,9E-11	1,2E-11	2,4E-12		
48,0	4,5E-14	2,9E-13	1,6E-12	7,3E-12	2,6E-11	7,0E-11	1,5E-10	2,5E-10	3,2E-10	3,3E-10	2,6E-10	1,6E-10	7,9E-11	3,0E-11	8,0E-12	2,1E-12	4,3E-13		
50,0	7,4E-15	4,7E-14	2,7E-13	1,2E-12	4,2E-12	1,2E-11	2,5E-11	4,2E-11	5,3E-11	4,4E-11	3,3E-11	2,7E-11	1,3E-11	4,9E-12	1,4E-12	3,4E-13	7,0E-14		
Abw. (Anzahl-%)		-4	-3,5	-3	-2,5	-2	-1,5	-1	-0,5	0	0,5	1	1,5	2	2,5	3	3,5	4	

Anhang 9: Sankey-Diagramm der räumlich aufgelösten Freisetzungsrechnung bei Kugelhaufenreaktoren

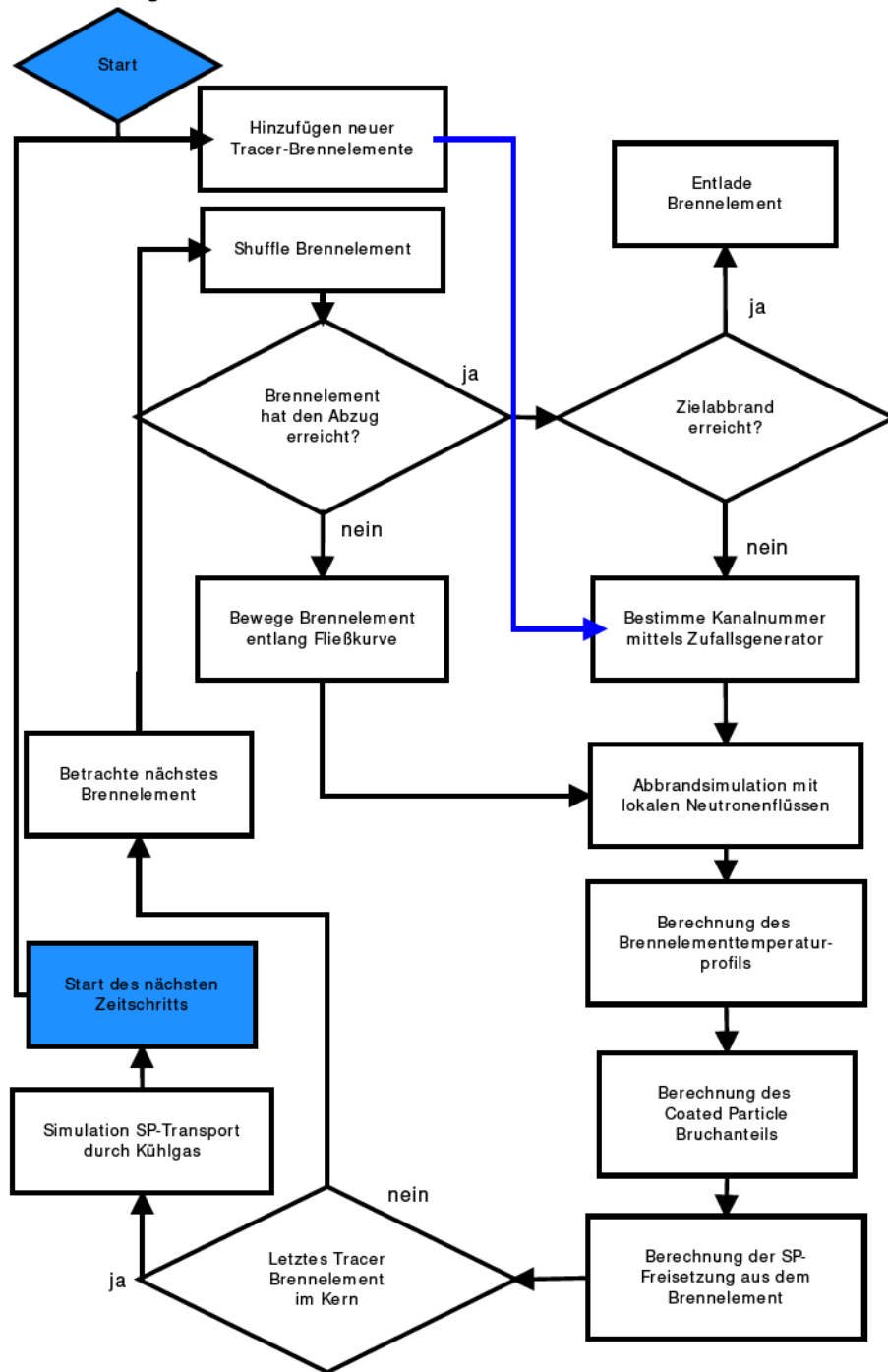


Abbildung A9.1: Sankey-Diagramm der räumlich aufgelösten Freisetzungsrechnung in STACY FullCore

Anhang 10: Vergleich der zeitlichen Verläufe des Abbrandes bei unterschiedlicher Modellierung des Brennstoffmanagements

Die Tabellen vergleichen die erzielten Abbrände am unteren Ende des ersten (innersten) und des vierten (äußersten) Kanals bei zwei unterschiedlichen Modellierungen des Brennstoffmanagements. Für das STACY-Brennstoffmanagement werden die Extremfälle gezeigt, bei denen das TRACER-Brennelement entweder ausschließlich durch den ersten Kanal oder durch den vierten Kanal geht.

Tabelle A10.1: Vergleich des Zeitlichen Abbrandverlaufs

a) VSOP-Ansatz: Mischen der Batches am Ende eines Durchlaufs

b) STACY-Ansatz: kein Mischen der Tracer-Brennelemente am Ende eines Durchlaufs

Zeitlicher Verlauf des Abbrandes beim VSOP-Brennstoffmanagement				Zeitlicher Verlauf des Abbrandes beim STACY-Brennstoffmanagement			
(Mischen der Batches am Ende eines Durchlaufs)				(kein Mischen der Tracer-Brennelemente am Ende eines Durchlaufs)			
Durch- lauf- zahl	Abbrand beim Entladen Kanal 1 (vor Mischen)	Abbrand beim Entladen Kanal 4 (vor Mischen)	Differenz in Abbrand zwischen Kanal 1 und 4	Durch- lauf- zahl	Abbrand beim Entladen Kanal 1 (15 x Kanal 1)	Abbrand beim Entladen Kanal 4 (15 x Kanal 4)	Differenz in Abbrand zwischen Kanal 1 und 4
	[MWd/t _{SM}]	[MWd/t _{SM}]	[MWd/t _{SM}]		[MWd/t _{SM}]	[MWd/t _{SM}]	[MWd/t _{SM}]
1	8.705	7.198	1.507	1	8.705	7.198	1.507
2	16.152	14.696	1.456	2	16.945	13.998	2.947
3	23.147	21.758	1.389	3	24.703	20.382	4.321
4	29.683	28.365	1.318	4	31.962	26.337	5.625
5	35.782	34.533	1.249	5	38.743	31.882	6.861
6	41.479	40.296	1.183	6	45.081	37.049	8.032
7	46.814	45.691	1.123	7	51.018	41.874	9.144
8	51.838	50.770	1.068	8	56.608	46.407	10.201
9	56.580	55.563	1.017	9	61.884	50.676	11.208
10	61.068	60.095	973	10	66.876	54.704	12.172
11	65.322	64.391	931	11	71.608	58.513	13.095
12	69.363	68.470	893	12	76.102	62.122	13.980
13	73.211	72.351	860	13	80.381	65.548	14.833
14	76.881	76.050	831	14	84.462	68.805	15.657
15	80.386	79.583	803	15	88.360	71.907	16.453

a)

b)

Anhang 11: Gebiet möglicher Kugelstagnation

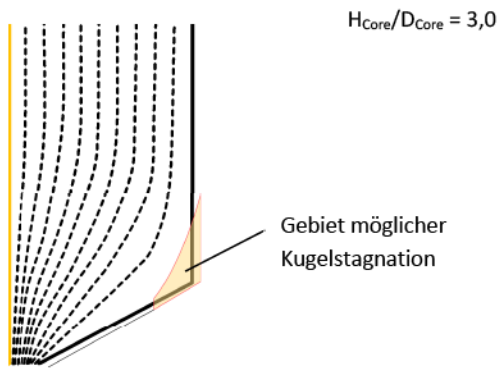


Abbildung A11.1: Gebiet möglicher Kugelstagnationen beim HTR-Modul [SIE1987] (überarbeitet)

Anhang 12: Region-gemittelte Neutronenflüsse (HTR-Modul)

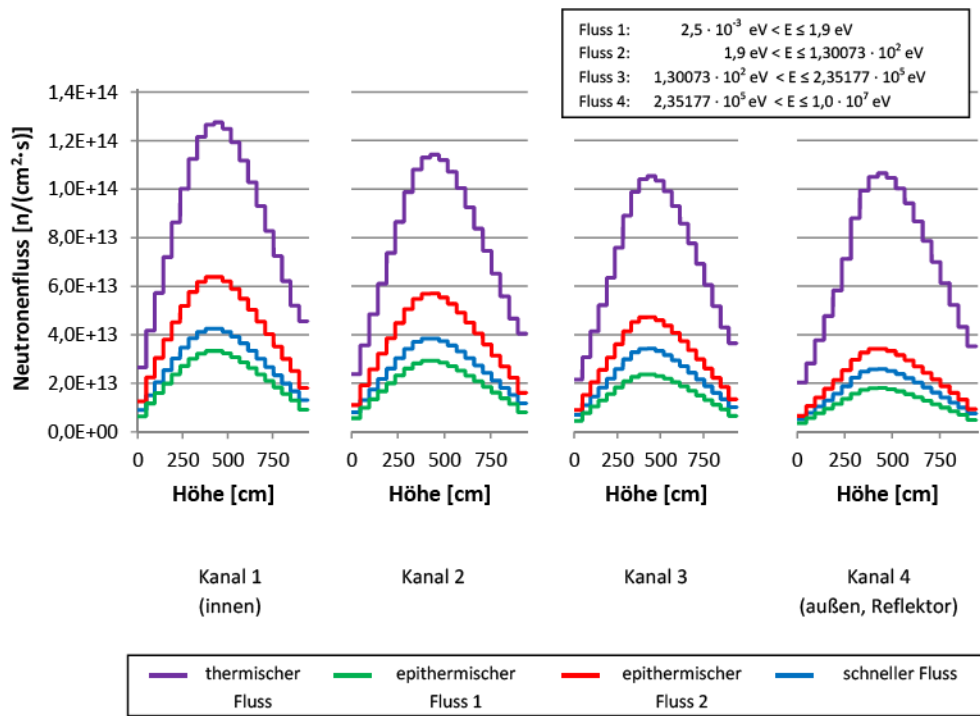


Abbildung A12.1: Region-gemittelte Neutronenflüsse als Eingabe für die Abbrandrechnung mit TNT, HTR-Modul, (eigene Darstellung)

Anhang 13: Kurzbeschreibung des STACY-Geometriemoduls

Das Programm BIRGIT übernimmt im Programmpaket VSOP99/09 die Aufteilung des Kugelhaufens in Fließkanäle und die Aufteilung dieser Fließkanäle in Regionen. Eine weitere wichtige Aufgabe des Programms ist die Bestimmung der Transformationsmatrix zwischen dem kartesischen Gitter der fluidmechanischen und neutronischen Rechnung und dem Gitter des Brennstoffmanagements. Diese Daten werden auch von STACY, z. B. zur Transformation von Spaltproduktkonzentrationen im Kühlgas usw., benötigt. Um die Fehleranfälligkeit deutlich zu reduzieren und Inkonsistenzen bzgl. Achsen usw. zu vermeiden, werden die vorher genannten Aufgaben von STACY selbst vorgenommen. Dieser Abschnitt beschreibt kurz den Aufbau der in STACY implementierten Routinen und die Verbesserungen des neuen Verfahrens gegenüber dem BIRGIT-Ansatz. Zusammen bilden die Routinen das STACY-Geometriemodul. Eine komplette Beschreibung ist in [XHO2013] vorzufinden.

Beschreibung der Geometrie

In STACY werden die Kanäle durch die Fließkurven festgelegt. Dabei kann abschnittsweise definiert werden, ob die Punkte zwischen den Stützpunkten der Fließkanäle mittels Lagrange- oder mittels linearer Interpolation bestimmt werden. Im ersten Fall werden die umgebenden Stützpunkte zur Bestimmung eines willkürlichen Punkts herangezogen. Im zweiten Fall werden die Stützpunkte durch eine Gerade verbunden. Diese Vorgehensweise erlaubt eine flexible Beschreibung des Kugelhaufens. So kann z. B. der Abzugstrichter mit Hilfe des neuen Verfahrens behandelt werden. Im Vergleich zu BIRGIT wird die gesamte Geometrie des aktiven Cores durch Fließkurven vorgegeben. Dies gilt somit auch für den äußeren und inneren Reflektor, falls diese vorhanden sind. Dies ermöglicht eine identische Behandlung eines jeden Kanals. Kanäle unterscheiden sich demnach nach Kanälen, die Teil der Kugelschüttung sind, die sogenannten Fließkanäle, und Kanälen, die Teil des Reflektors sind.

Bestimmung der Transformationsmatrix

Die Transformationsmatrix erlaubt die Transformation von Daten von einem Gitter in das jeweils andere. Diese Matrix wird nur für den Core-Bereich benötigt. Im Vergleich zu BIRGIT wird das Gitter in STACY nicht in sogenannte Mini-Volumina unterteilt, sondern die Transformationsmatrix wird direkt bestimmt. Dazu wird im ersten Schritt für jede Masche bestimmt, mit welchen Kanälen sie Volumen teilt. Für diese Kanäle wird dann im zweiten Schritt bestimmt, mit welchen Regionen dieses Kanals bzw. dieser Kanäle diese Maschen gemeinsames Volumen teilt bzw. teilen. Im dritten Schritt wird abschließend bestimmt, wie groß diese geteilten Volumina sind. Dazu werden die Schnittpunkte der jeweiligen Fließkurve mit den Maschengrenzen bestimmt (siehe Abbildung A13.1). Schnittpunkte können mit den radialen und/oder vertikalen Maschengrenzen vorliegen.

Aufgrund des laminaren Fließcharakters des Kugelhaufens können Fließkurven sich nicht schneiden. Somit können bei einer Fließkurve, deren Radius mit abnehmender axialer Höhe zunimmt, nur die folgenden Fälle auftreten (siehe Abbildung A13.1):

1. Die Fließkurve schneidet die untere und obere vertikale Begrenzungslinie der Masche.
2. Die Fließkurve schneidet die obere und die in radialer Richtung äußere (rechte) Begrenzungslinie.
3. Die Fließkurve schneidet die innere (linke) und äußere (rechte) radialen Begrenzungslinie.
4. Falls die Fließkurve vollständig zur linken bzw. zur rechten Seite der inneren (linken) bzw. äußeren (rechten) Begrenzungslinie liegt, wird lediglich das Volumen eines Hohlzylinders bestimmt.

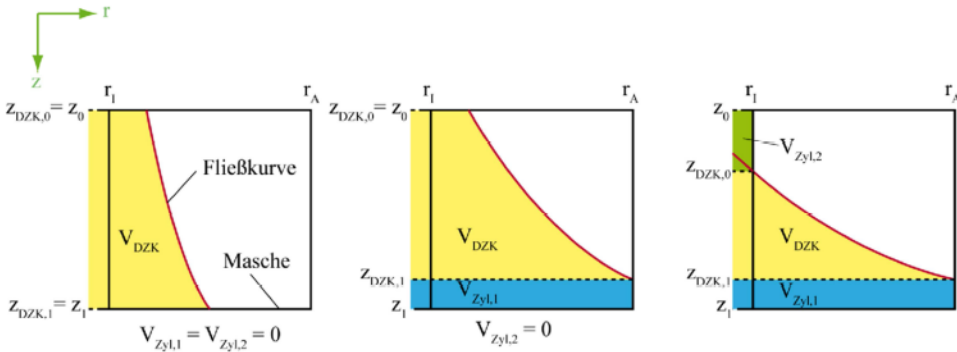


Abbildung A13.1: Mögliche Fälle bei Bestimmung der Teilvolumina (Radius der Fließkurve nimmt mit zunehmenden Wert von „z“ zu)

Ähnliche Überlegungen können für eine Fließkurve, deren Radius mit zunehmendem Wert von „z“ abnimmt angestellt werden. Da die Überlegung und Vorgehensweise sehr ähnlich ist, wird dies an dieser Stelle nicht weiter diskutiert.

Das Volumen des rotationszylindrischen Körpers lässt sich in jedem Fall durch eine Kombination von Hohlzylindern und Körpern, deren Volumen sich mit Hilfe der Simpson-Integration berechnen lässt, zusammensetzen (siehe Abbildung A13.2). Das Volumen wird nach folgender Gleichung bestimmt:

$$V = V_{Zyl,1} + V_{DZK} + V_{Zyl,2} \quad A13.1$$

$$V_{Zyl,1} = \pi \cdot h_{Zyl,1} \cdot r_A^2 \quad A13.2$$

$$V_{Zyl,2} = \pi \cdot h_{Zyl,2} \cdot r_I^2 \quad A13.3$$

$$V_{DZK} = \int_{z_{DZK,0}}^{z_{DZK,1}} \pi \cdot r(z)^2 \quad A13.4$$

mit:	V_{Zyl}	- Zylindervolumen	$[m^3]$
	$V_{Simpson}$	- Volumen des drehzylindrischen Körpers	$[m^3]$
	h_{Zyl}	- Höhe des Zylinders	$[m]$
	$z_{DZK,0}, z_{DZK,1}$	- obere bzw. untere vertikale Begrenzung des drehzylindrischen Körpers	$[m]$
	r_I, r_A	- Innen- bzw. Außenradius der Masche	$[m]$

Je nach Fließkurve ist Volumen $V_{Zyl,1}$, $V_{Zyl,2}$ oder V_{DZK} nicht vorhanden (siehe Abbildung A13.1). So ist das Volumen V_{DZK} nur im zylindrischen Teil des Kugelhauens, in dem die Fließlinien senkrecht laufen, nicht vorhanden. Die Simpson-Integration wird später in diesem Abschnitt vorgestellt. Die Volumenberechnung wird für die innere und die äußere Fließkurve des Kanals durchgeführt. Die Differenz aus den beiden Volumina ist das gesuchte Teilvolumen, das vollständig Teil eines bestimmten Kanals und einer bestimmten Masche ist und somit von beiden geteilt wird (siehe Abbildung A13.2). Ein solches Volumen bildet einen Eintrag in der Transformationsmatrix. Dieser Prozess wird für jede Masche im aktiven Core wiederholt.

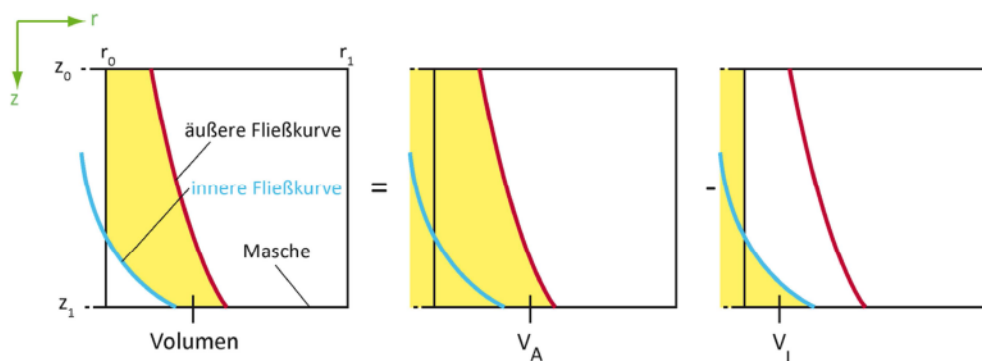


Abbildung A13.2: Bestimmung eines Eintrags der Transformationsmatrix

Die Genauigkeit der Transformationsmatrix wird durch das Aufsummieren der zu jeder Masche gehörenden Teilvolumina und dem anschließenden Vergleich mit dem geometrischen Maschenvolumen überprüft. Eine vergleichbare Überprüfung wird für die Regionen durchgeführt. Ein Fehler kann somit am Ende des Algorithmus eindeutig festgestellt werden.

Simpson-Integration

Das Volumen des rotationszylindrischen Körpers, das durch eine Rotation (eines Teils) der Fließkurve um die Symmetrieachse entsteht, wird sowohl in BIRGIT als auch in STACY mit Hilfe der Simpson-Integration bestimmt. Dabei wird das Volumen in „N“ Segmente bzw. Scheiben mit einer identischen Dicke „ Δz “ aufgeteilt. Das Volumen des rotationszylindrischen Körpers bestimmt sich nach folgender Gleichung:

$$V(r) = \pi \cdot \frac{\Delta z}{3} \cdot \left(f(z_0) + 2 \cdot \sum_{k=1}^{N-1} f(z_k) + 4 \cdot \sum_{k=1}^{N-1} f(z_{2k-1}) + f(z_N) \right), \quad f(z_k) = r(z_k)^2 \quad \text{A13.5}$$

mit:	$r(z_k)$	- Radius an der vertikalen Position z_k	[m]
	N	- Anzahl Segmente	
	k	- Laufindex	
	Δz	- Abstand in vertikaler Richtung zwischen zwei Stützstellen (Dicke eines Segments)	[m]

Zur Erlangung einer hohen Genauigkeit müssen bei dieser numerischen Integration viele Intervalle „N“ benutzt werden. Üblicherweise übersteigt diese Anzahl der Anzahl der Stützpunkt der Fließkurve deutlich. Die Stützpunkte der Integration, die nicht mit einem Stützpunkt der vorgegebenen Fließkurve übereinstimmen, werden mit Hilfe der Lagrange-Interpolation bestimmt.

Lagrange-Interpolation

Der Radius wird für vertikale Positionen, die nicht mit einer Stützstelle der Fließkurve zusammenfallen, mit Hilfe der Lagrange-Interpolation nach folgender Gleichung bestimmt [ARE2009]:

$$r(z) = \sum_{i=1}^n r_i \cdot \prod_{k=0, k \neq i}^n \frac{z - z_k}{z_i - z_k} \quad \text{A13.6}$$

mit:	$r(z)$	- Radius an der vertikalen Position „z“	[m]
	z_k	- diskrete Stützstelle der Fließkurve (vertikal)	[m]
	r_i	- diskrete Stützstelle der Fließkurve (radial)	[m]
	k	- Laufindex	
	i	- Laufindex	
	n	- Anzahl der benachbarten Stützstellen, die zur Interpolation herangezogen werden	

Rechnungen haben gezeigt, dass die Berücksichtigung von drei Nachbarn ($n = 3$) bei der Interpolation in diesem Anwendungsfall am besten ist. Aufgrund des langen zylindrischen Teils der Kugelschüttung, würde eine höhere Anzahl dazu führen, dass der Übergangsbereich zwischen dem zylindrischen Teil und dem Konus nicht gut abgebildet wird.

Insgesamt konnte gezeigt werden, dass die Genauigkeit des hier vorgestellten direkten Verfahrens zur Bestimmung der Transformationsmatrix höher ist, als das Verfahren mit den Mini-Volumen, das in VSOP-BIRGIT genutzt wird. Des Weiteren wurde das neue Verfahren für verschiedene Reaktoren (HTR-Modul, HTR-10, PBMR) an BIRGIT verifiziert. Dabei stellte sich heraus, dass die direkte Berechnung deutlich schneller ist.

Anhang 14: Bilanzgleichung einer Masche in der Diffusions- und Konvektionsrechnung

Konvektionsterm:

$$\begin{aligned}
 \Delta \text{Inv}_{\text{Konv},i,j} = & A_{\text{Lat},i,j} \cdot \Delta t \cdot v_{i,j-1} \cdot c_{i,j+1} & v_{i,j-1} > 0 & \text{links} \\
 & -A_{\text{Lat},i,j} \cdot \Delta t \cdot v_{i,j+1} \cdot c_{i,j+1} & v_{i,j+1} < 0 & \text{rechts} \\
 & +A_{\text{Grund},j} \cdot \Delta t \cdot u_{i-1,j} \cdot c_{i+1,j} & u_{i-1,j} < 0 & \text{oben} \\
 & -A_{\text{Grund},j} \cdot \Delta t \cdot u_{i+1,j} \cdot c_{i+1,j} & u_{i+1,j} > 0 & \text{unten} \\
 & -A_{\text{Lat},i,j} \cdot \Delta t \cdot |v_{i,j}| \cdot c_{i,j} \\
 & -A_{\text{Grund},j} \cdot \Delta t \cdot |u_{i,j}| \cdot c_{i,j}
 \end{aligned}$$

Diffusionsterm:

$$\begin{aligned}
 \Delta \text{Inv}_{\text{Diff},i,j} = & \frac{2 \cdot D_{\text{Rad},i,j} \cdot A_{\text{Lat},i,j} \cdot \Delta t}{r_{j+1} - r_{j-1}} (c_{i,j-1} - c_{i,j}) & \text{links} \\
 & + \frac{2 \cdot D_{\text{Rad},i,j+1} \cdot A_{\text{Lat},i,j+1} \cdot \Delta t}{r_{j+2} - r_j} (c_{i,j+1} - c_{i,j}) & \text{rechts} \\
 & + \frac{2 \cdot D_{\text{Vert},i,j+1} \cdot A_{\text{Grund},j} \cdot \Delta t}{z_{i+1} - z_{i-1}} (c_{i-1,j} - c_{i,j}) & \text{oben} \\
 & + \frac{2 \cdot D_{\text{Vert},i+1,j} \cdot A_{\text{Grund},j} \cdot \Delta t}{z_{i+1} - z_i} (c_{i+1,j} - c_{i,j}) & \text{unten}
 \end{aligned}$$

Mascheninterne Quelle bzw. Senke:

$$\Delta \text{Inv}_{Q,i,j} = Q_{i,j} \cdot \Delta t \cdot \epsilon_{i,j} \cdot v_{i,j}$$

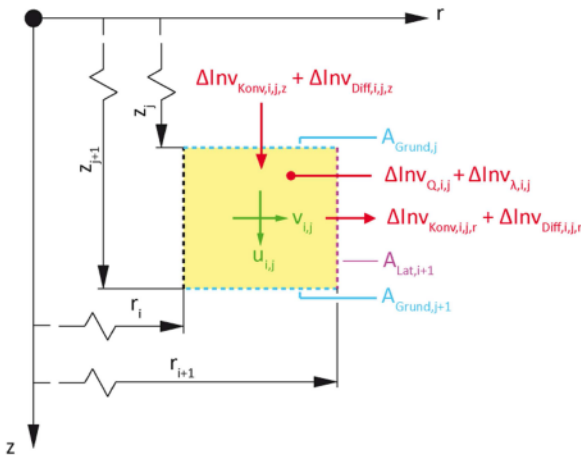


Abbildung A14.1: Bilanzierung des Spaltproduktinventars im Kühlgas innerhalb einer Masche (eigene Darstellung)

Radioaktiver Zerfall:

$$\Delta \text{Inv}_{\lambda, i, j} = c_{i, j} \cdot \epsilon_{i, j} \cdot V_{i, j} \cdot (1 - e^{-\lambda \cdot \Delta t})$$

mit:	A_{Grund}	- Grundfläche der Masche	$[\text{m}^2]$
	A_{Lat}	- laterale Begrenzungsfläche der Masche	$[\text{m}^2]$
	D	- Diffusionskoeffizient	$[\text{m}^2/\text{s}]$
	r	- radiale Begrenzung der Masche	$[\text{m}]$
	z	- axiale Begrenzung der Masche	$[\text{m}]$
	u	- vertikale Geschwindigkeitskomponente	$[\text{m/s}]$
	v	- radiale Geschwindigkeitskomponente	$[\text{m/s}]$
	ϵ	- örtlicher Leervolumenanteil (Leerraumfaktor)	
	λ	- Zerfallskonstante des Nuklids	$[1/\text{s}]$

In FRESCO-II wird für die Stoffübergangszahl am Übergang vom Brennstoffelement zum Kühlgas ein sehr hoher Wert ($50 \text{ cm}^2/\text{s}$) angesetzt. Dies führt dazu, dass die Spaltprodukte ungehemmt in das Kühlgas übergehen können. Diese Vorgehensweise ist für konservative Abschätzungen gut geeignet. Als Ergänzung wurde für Best-Estimate-Rechnungen, bei denen ein komplettes Core unter Normalbetriebsbedingungen betrachtet wird, ein Modell zur Beschreibung der Stoffübergangszahl hinterlegt [JES1964].

$$\beta = \text{Sh} \cdot \frac{D_{\text{Sp}}}{D_{\text{BE}}} \cdot \frac{1-\epsilon}{\epsilon} \quad \text{A14.1}$$

mit:	Sh	- Sherwoodzahl	
	ϵ	- örtlicher Leervolumenanteil (Leerraumfaktor)	
	D_{BE}	- Kugeldurchmesser	$[\text{m}]$
	D_{Sp}	- binärer Diffusionskoeffizient	$[\text{m}^2/\text{s}]$

Die Sherwoodzahl Sh berechnet sich nach folgender Gleichung [JES1964]: A14.2

$$\text{Sh} = \text{Re} \cdot \text{Sc}^{1/3} \cdot (0,12 + \epsilon) \cdot \left(\frac{3,72}{\text{Re}^{2/3}} + \frac{1,06}{30 + \text{Re}^{1/3}} \right)$$

mit:	Sc	- Schmidtzahl
	Re	- Reynoldszahl

Der binäre Diffusionskoeffizient berechnet sich nach folgender Gleichung [BER1988]:

$$D_{\text{Sp}} = K_D \cdot \frac{\sqrt{\frac{1}{M_{\text{He}}} + \frac{1}{M_{\text{Sp}}}}}{(\sigma_{\text{He}} + \sigma_{\text{Sp}})^2} \cdot \left(\frac{\epsilon}{K} \right)_{\text{He}}^{B/2} \cdot \left(\frac{\epsilon}{K} \right)_{\text{Sp}}^{B/2} \cdot \frac{T^{1,5-B}}{\rho_{\text{He}}} \cdot \frac{1}{1,0 \cdot 10^4} \quad [\text{m}^2/\text{s}] \quad \text{A14.3}$$

mit:	M_{He}	- Molmasse von Helium	$[\text{g/mol}]$
	M_{Sp}	- Molmasse des Spaltproduktes	$[\text{g/mol}]$
	ϵ/K	- charakteristische Schwingungstemperatur	$[\text{K}]$
	σ	- Teilchendurchmesser (Lennard-Jones-Parameter)	$[\text{\AA}]$
	T	- Temperatur	$[\text{K}]$
	B	- Konstante = -0,1558	
	ρ_{He}	- Kühlgasdruck	$[\text{bar}]$

Dabei lässt sich der Faktor K_D nach folgender Gleichung bestimmen.

$$K_D = 2,522813 \cdot 10^{23} \cdot \frac{\text{J}^{1,5}}{k_B^{1,5} \cdot \text{mol}^{1,5}} \quad \text{A14.4}$$

mit: k_B - Boltzmann-Konstante ($1,3806488(13) \cdot 10^{23} \text{ J/K}$) [J/K]

Für die Berechnung der Dichte von Helium ρ_{He} und dessen kinematischer Viskosität η_{He} wird die KTA-Regel 3102.1 [KTA1978] genutzt. Das charakteristische Längenmaß wird gleich dem hydraulischen Durchmesser angenommen:

$$D_{\text{Hyd}} = \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon} \cdot D_{\text{BE}} \quad \text{A14.5}$$

Anhang 15: RZ-Neutronik-Gitter des HTR-Modul in ZIRKUS

Kurzbeschreibung der Modellierung des HTR-Modul in ZIRKUS und generelle Unterschiede zwischen ZIRKUS und VSOP:

- Jeder Fließkanal ist in 6 Regionen unterteilt (paralleles Kugelfließen). Dies ist allerdings keine Einschränkung in ZIRKUS, sondern eine Modellannahme. Die Kugelschüttungsoberfläche wird detailliert abgebildet. In dem VSOP-Modell kann die Oberfläche nur als Ebene abgebildet werden.
- Der Hohlraum oberhalb der Kugelschüttung ist zweigeteilt. In VSOP besteht der Hohlraum definitionsgemäß aus einer Region.
- Die Kontur der Fließkanäle wird durch eine Treppenfunktion approximiert, wodurch jede Feinmasche eindeutig einem Fließkanal zugewiesen ist. Deswegen wird keine Transformationsmatrix wie in VSOP benötigt. In VSOP kann die Berandungskurve eines Fließkanals als stetige Kurve definiert werden.

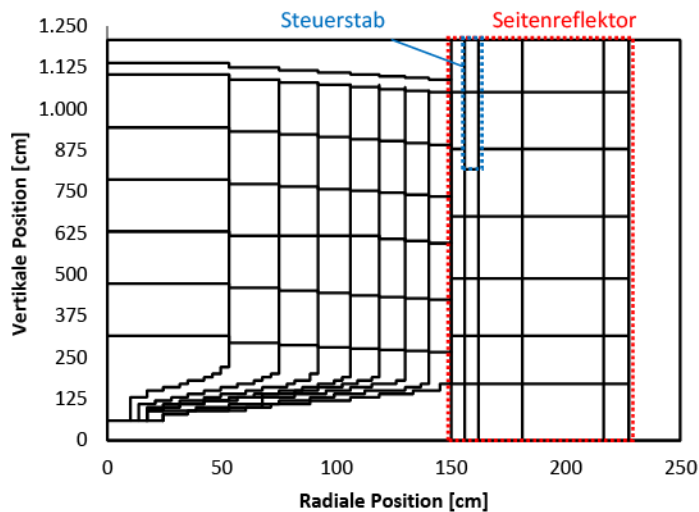


Abbildung A15.2: Neutronik-Gitter im ZIRKUS-Modell des HTR-Modul [SIE1987] (eigene Darstellung)

Anhang 16: Modellierung des PBMR-400 in VSOP 99/09

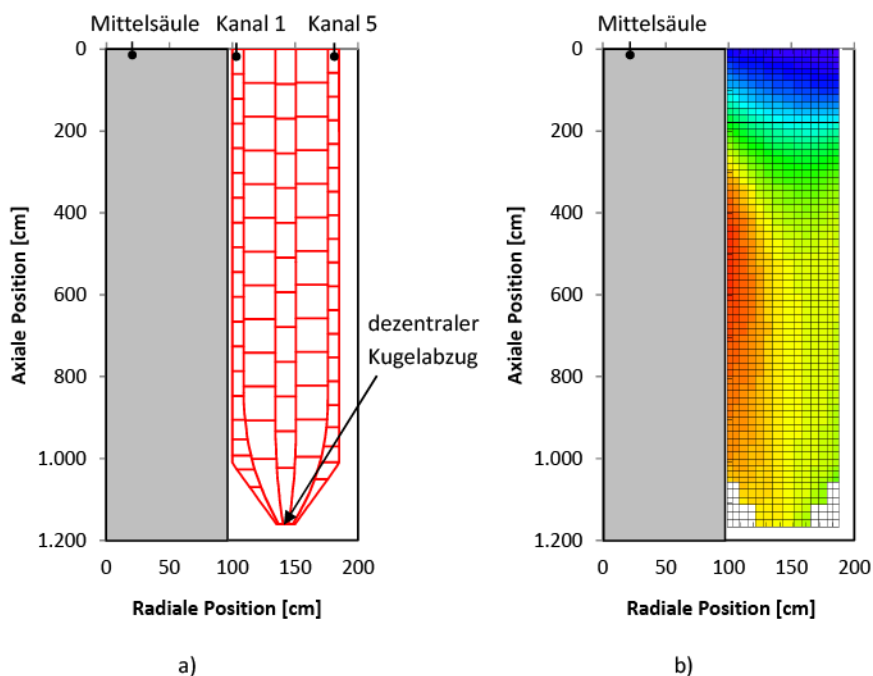


Abbildung A16.1 a) Einteilung des Fließgitters des PBMR-400 in VSOP (20/13/13/13/20 Regionen)
 b) Brennelementzentraltemperatur von Brennelementen im ersten Durchlauf
 (PBMR-400, VSOP 99/09-Rechnung)

Anhang 17: Einteilung der Fließkanäle (ANABEK-Versuchsstand)

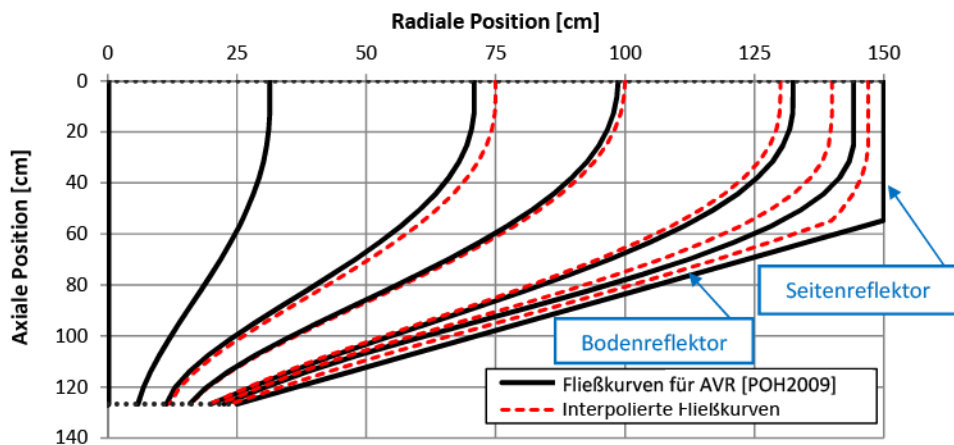


Abbildung A17.1: Einteilung der Fließkanäle im unteren Bereich des VSOP-Modells vom ANABEK-Versuchsstand

Anhang 18: Einteilung der Regionen bei den VSOP-Modellen des HTR-Modul

Tabelle A18.1: Einteilung der Regionen bei den VSOP-Modellen M1, M2 und M3 des HTR-Modul

Kanal- nummer	Modell M1		Modell M2		Modell M3	
	Außenradius* [cm]	Anzahl Regionen	Außenradius* [cm]	Anzahl Regionen	Außenradius* [cm]	Anzahl Regionen
1	75,0	20	75,0	16	75,0	16
2	106,066	20	100,0	16	100,0	16
3	129,904	20	130,0	17	130,0	17
4	150,0	20	140,0	18	140,0	18
5	n. v.	n. v.	147,0	20	147,0	20
6	n. v.	n. v.	150,0	27	150,0	27

*: Außenradius des Kanals an der Kugelschüttungs Oberfläche (n. v. = nicht vorhanden)

Anhang 19: Eigenschaften der Materialien in der fluid mechanischen Rechnung des HTR-Modul in VSOP

Material- kennung	Art des Materials	Anteil des Fest- stoff- volumens	Austausch zwischen Feststoff und Fluid	Wärme- kapazität im Feststoff / ID der Funktion c_{pD}	Wärmeleit- fähigkeit im Feststoff / ID der Funktion λ_{pD}	Richtung in der Wärme- strahlung berücksichtigt wird	$\lambda_{pD} = 1$: Gasdruck / $\lambda_{pD} = 3$: $\lambda(T=0^\circ\text{C})$ (siehe λ_{pD})	Emissivität an der inneren bzw. oberen Begrenzung	Emissivität an der äußeren bzw. unteren Begrenzung	Wärme- übergangs- koeffizient im Fluid
				[J/(cm ³ ·K)]	[W/(cm ³ ·K)]		[bar] / [W/(cm ³ ·K)]			[W/(cm ² ·K)]
HET	Feststoff	0,61	ja	1	4	radial	-	-	-	-
SRO	Feststoff	1	nein	5	0,47	radial	-	-	-	-
SRM	Feststoff	1	nein	5	0,47	radial	-	-	-	-
KGF	Feststoff	0,784	ja	4	0,26	radial	-	-	-	-
KST	Feststoff	1	ja	2	0,087	radial	-	-	-	-
BRB	Feststoff	0,87	ja	4	3	radial	1,2	-	-	-
SPS	Feststoff	0	nein	0,001	1	radial	60	0,75	0,8	-
HLR	Feststoff	0	ja	0,001	1	axial	60	0,9	0,9	-
DRO	Feststoff	0,84	ja	4	3	radial	1,2	-	-	-
KGK	Feststoff	0,1	ja	4	3	radial	1,2	-	-	-
BRU	Feststoff	0,87	ja	4	3	radial	1,2	-	-	-
RAU	Fluid	0	-	-	-	radial	-	-	-	1,00E-06
HGK	Feststoff	0,5	ja	4	3	radial	1,2	-	-	0
SPI	Feststoff	0	nein	0,001	1	radial	60	0,9	0,75	-
RAO	Fluid	0	-	-	-	radial	-	-	-	1,00E-06
DRU	Feststoff	0,84	ja	4	3	radial	0,6	-	-	-
KBH	Feststoff	1	nein	3	2	radial	-	-	-	-
DBH	Feststoff	1	nein	3	2	radial	-	-	-	-
SSL	Feststoff	0	nein	0,001	1	radial	1	0,8	0,8	-
FLK	Fluid	0	-	-	-	radial	-	-	-	0,78
SPO	Feststoff	0	nein	0,001	1	axial	60	0,8	0,8	-
RFO	Feststoff	1	nein	4	3	radial	1,2	-	-	-
KBH	Feststoff	1	nein	3	2	radial	-	-	-	-
BRO	Feststoff	0,87	ja	4	3	radial	0,6	-	-	-

*: Bedeutung des Werts hängt von der gewählten Wärmeleitfähigkeitsfunktion ab

Material- kennung	Art des Materials	Anteil des Fest- stoff- volumens	Austausch zwischen Feststoff- volumen mit dem Fluid	Wärme- kapazität im Feststoff / ID der Funktion c_{pD}	Wärmeleit- fähigkeit im Feststoff / ID der Funktion λ_{pD}	Richtung in der Wärme- strahlung berücksichtigt wird	$\lambda_{pD} = 1$: Gasdruck / $\lambda_{pD} = 3$: $\lambda(T=0^\circ\text{C})$ (siehe λ_{pD})	Emissivität an der inneren bzw. oberen Begrenzung	Emissivität an der äußeren bzw. unteren Begrenzung	Wärme- übergangs- koeffizient im Fluid
				[J/(cm ² ·K)]	[W/(cm ² ·K)]		[bar] / [W/(cm ² ·K)]			[W/(cm ² ·K)]
SR1	Feststoff	1	nein	5	0,2	radial	-	-	-	-
SR2	Feststoff	1	nein	5	0,2	radial	-	-	-	-
SR3	Feststoff	1	nein	5	0,2	radial	-	-	-	-
SR4	Feststoff	1	nein	5	0,2	radial	-	-	-	-
SR5	Feststoff	1	nein	5	0,2	radial	-	-	-	-
RO1	Feststoff	0,697	nein	4	0,2	radial	-	-	-	-
RO2	Feststoff	0,697	nein	4	0,2	radial	-	-	-	-
RO3	Feststoff	0,697	nein	4	0,2	radial	-	-	-	-
RO4	Feststoff	0,697	nein	4	0,2	radial	-	-	-	-
RO5	Feststoff	0,697	nein	4	0,2	radial	-	-	-	-
RF1	Feststoff	1	nein	5	0,47	radial	-	-	-	-
RF2	Feststoff	1	nein	5	0,47	radial	-	-	-	-
RF3	Feststoff	1	nein	5	0,47	radial	-	-	-	-
RF4	Feststoff	1	nein	5	0,47	radial	-	-	-	-
RF5	Feststoff	1	nein	5	0,47	radial	-	-	-	-
QUE	Feststoff	0,05	ja	4	3	radial	1,2	-	-	-
SRR	Feststoff	0,784	ja	4	0,26	radial	-	-	-	-
SIN	Feststoff	0,05	ja	4	3	radial	1,2	-	-	-

Wärmekapazitätsfunktionen	
c_{pD}	Beschreibung
1	Reaktorgraphit (Dichte = 1,75 g/cm ³)
2	Kohlenstein (Dichte = 1,55 g/cm ³)
3	V2A-Stahl (DIN-4541)
4	Reaktorgraphit (Dichte = 1,60 g/cm ³)
5	Reaktorgraphit (Dichte = 1,80 g/cm ³)

Wärmeleitfähigkeitsfunktionen	
λ_{pD}	Beschreibung
1	Helium (Wärmeleitfähigkeit in Abhängigkeit vom Druck)
2	V2A-Stahl (DIN-4541)
3	Reaktorgraphit
4	Effektive Wärmeleitfähigkeit im Kugelhaufen nach Robolt + Zehner-Schlünder

*: Bedeutung des Werts hängt von der gewählten Wärmeleitfähigkeitsfunktion ab

Anhang 20: Zuweisung der Materialien für die fluiddynamische Rechnung des HTR-Modul in VSOP, Modell M3

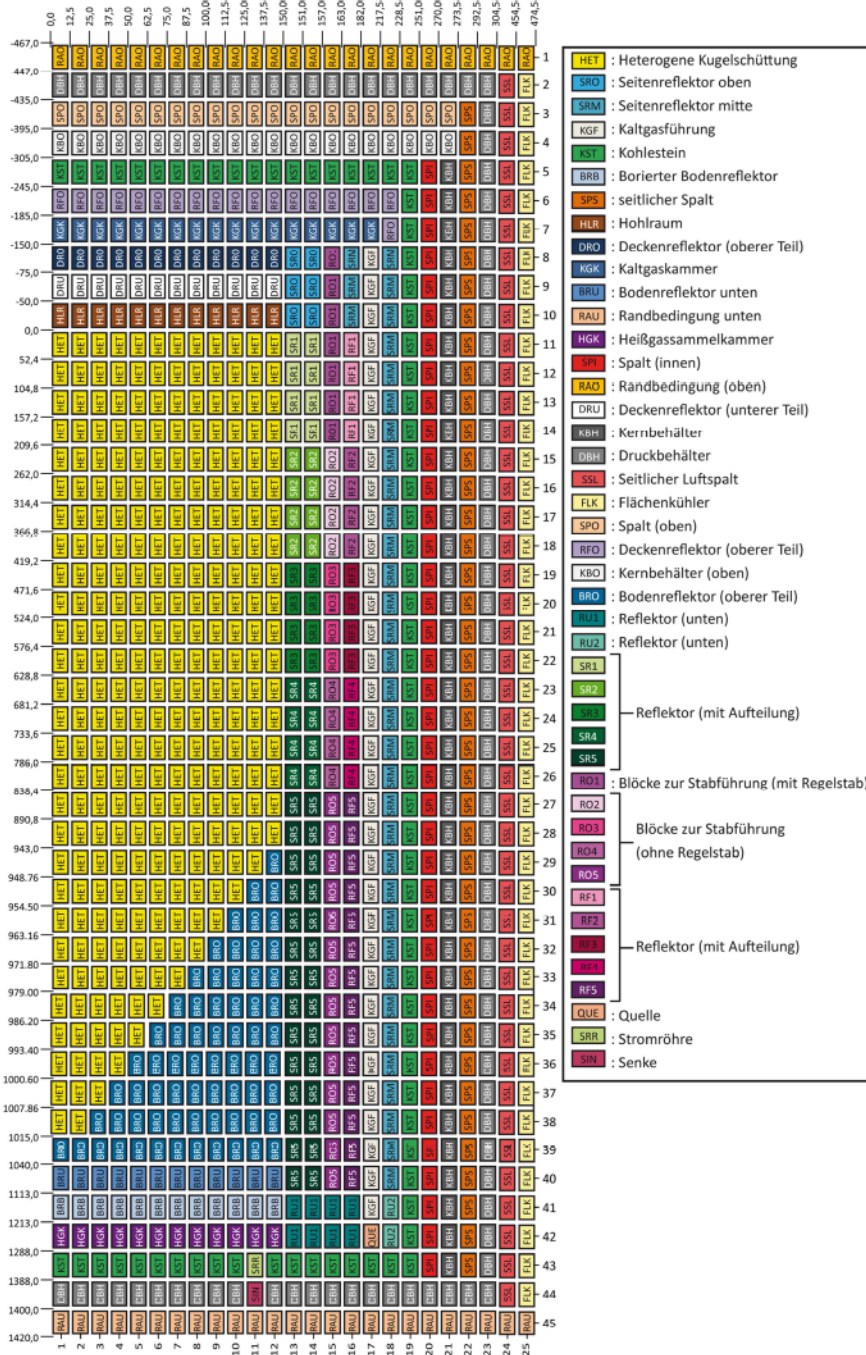


Abbildung A20.1: Zuweisung der Materialien für die fluiddynamische Rechnung des HTR-Modul in VSOP, Modell M3 (keine maßstabsgetreue Darstellung)

Anhang 21: Effektive Wärmeleitfähigkeit im Reaktorcore (Kugelschüttung) nach Zehner/Schlünder und Robold/Barthels mit erster und zweiter Bandbreite

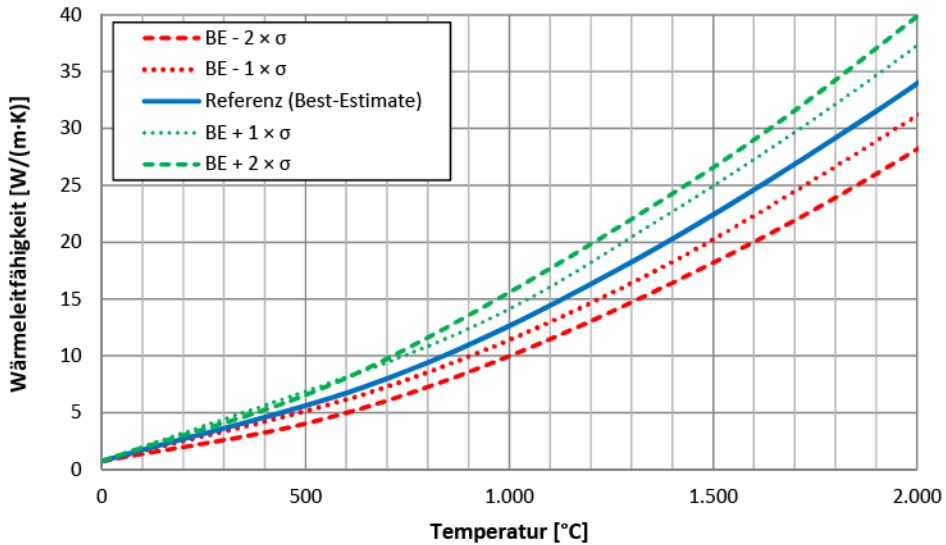


Abbildung A21.1: Effektive Wärmeleitfähigkeit in der Kugelschüttung eines HTR in Abhängigkeit der Temperatur (mit Berücksichtigung von Ausheizeffekten im Matrixgraphit) [JAH1991], BE = Best Estimate (eigene Darstellung)

Tabelle A21.1: Standardabweichungen in der Berechnung der effektiven Wärmeleitfähigkeit

Eingangsgröße	Variable	Einheit	$1 \times \sigma$	$2 \times \sigma$
			[]	[]
Emissionskoeffizienten	ε	-	5.88	11.76
Schüttungsporosität	P	-	2.53	5.06
Formfaktor	B	-	0	0
Wärmeleitfähigkeit Feststoff	λ_f	[W/(m·K)]	10	20
Wärmeleitfähigkeit Gas	λ_g	[W/(m·K)]	5	10

Eine Auswertung bei 1.600°C liefert die in Tabelle A21.2 dargestellten Übersicht [JA1992]. Die effektive Wärmeleitfähigkeit bei Best-Estimate Eingangsgrößen beträgt 24,964 W/(m·K).

Tabelle A21.2: Berechnung der effektiven Wärmeleitfähigkeit

Eingangsgröße	Variable	Einheit	$-2 \times \sigma$	$-1 \times \sigma$	$+1 \times \sigma$	$+2 \times \sigma$
			[]	[]	[]	[]
Emissionskoeffizienten	ε	-	-11.76	-5.88	5.88	11.76
Schüttungsporosität	P	-	-5.06	-2.53	2.53	5.06
Wärmeleitfähigkeit Feststoff	λ_f	[W/(m·K)]	-20	+10	+10	20
Wärmeleitfähigkeit Gas	λ_g	[W/(m·K)]	-10	+5	+5	10
Eff. Wärmeleitfähigkeit & Änderung bzgl. Best-Estimate		[W/(m·K)] []	22,688 -19,34	20,490 -9,12	27,335 +9,5	29,794 +17,92

Anhang 22: STADIF zugrunde liegende Daten des HTR-Modul-Gleichgewichtscores und Vergleich der Oberflächentemperaturen

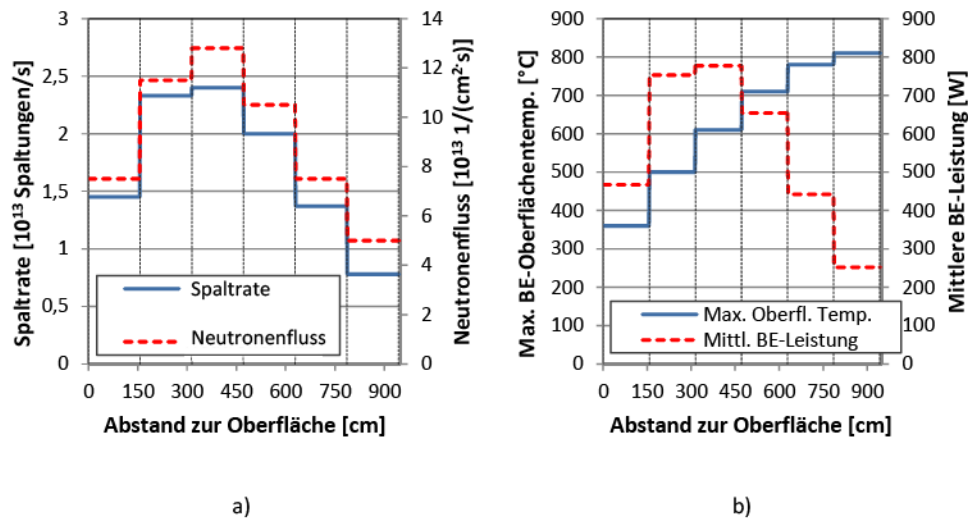


Abbildung A22.1: STADIF zugrunde liegende Daten des HTR-Modul

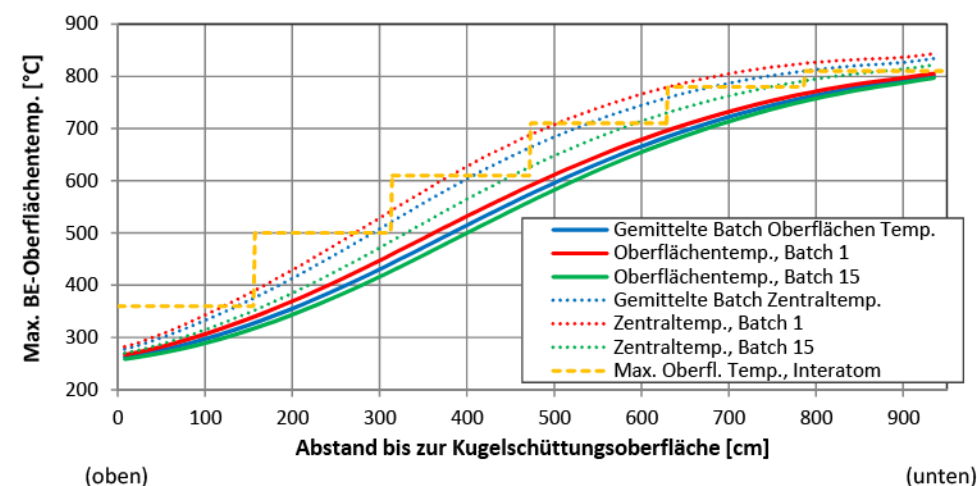


Abbildung A22.2: In STADIF verwendete maximale Oberflächentemperaturen im Vergleich zu den mit VSOP ermittelten Temperaturen, HTR-Modul

Anhang 23: Mittlere Verweilzeit bei Variationen des HTR-Modul

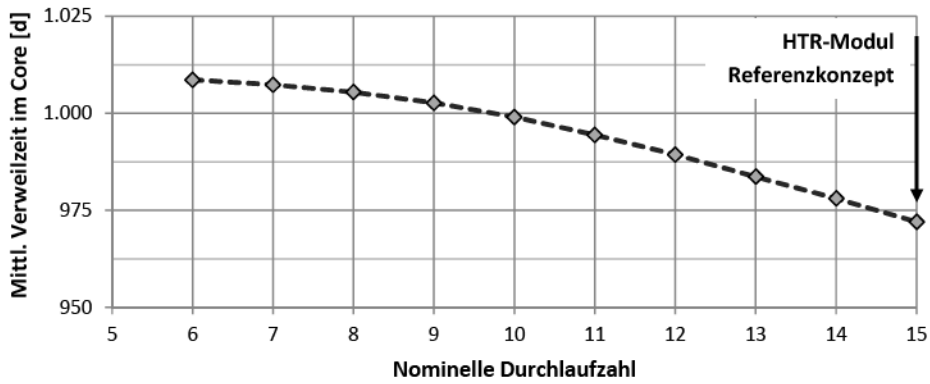
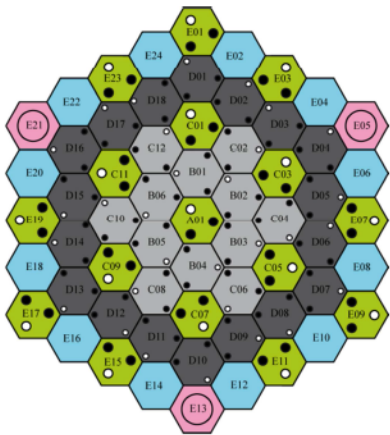
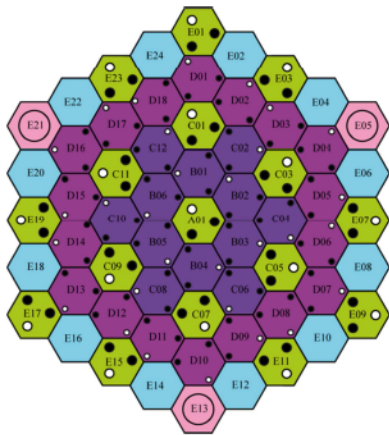


Abbildung A23.1: Mittlere Verweilzeit der Brennelemente im Core in Abhängigkeit von der nominellen Durchlaufzahl (HTR-Modul)

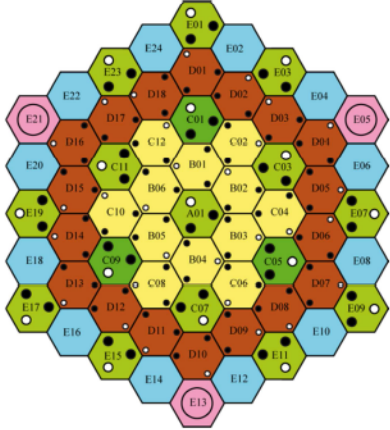
Anhang 24: Modellierung des HTTR in Serpent



Deckenreflektor – Schicht 1



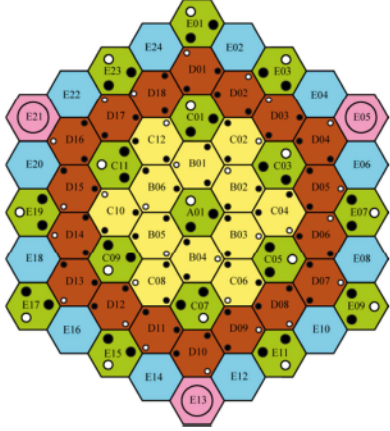
Deckenreflektor – Schicht 2



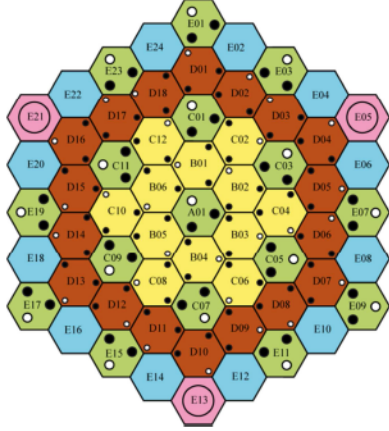
Brennstoffblockschicht 1



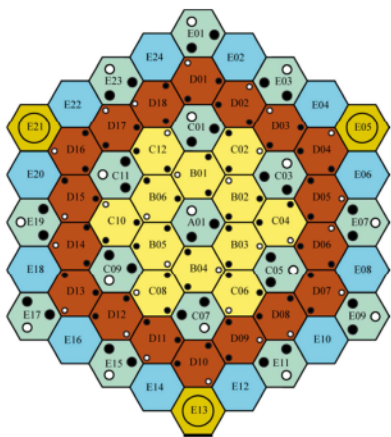
Brennstoffblockschicht 2



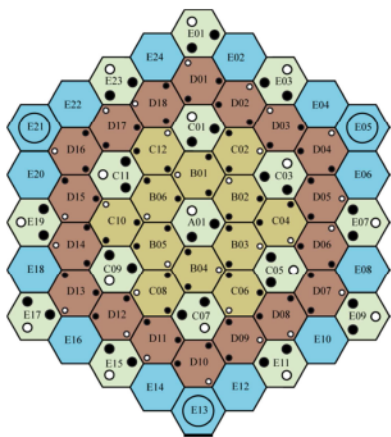
Brennstoffblockschicht 3



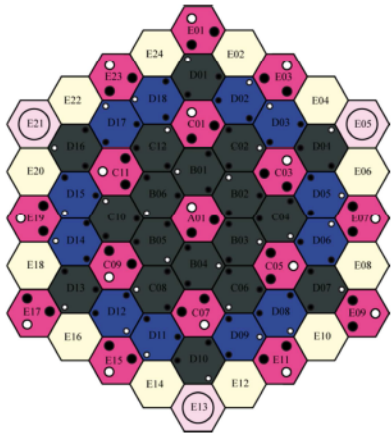
Brennstoffblockschicht 4



Brennstoffblöckschicht 5



Bodenreflektor – Schicht 1



Bodenreflektor – Schicht 2

- Brennstoffblock mit 31 Brennstäben
- Brennstoffblock mit 33 Brennstäben
- Kontrollstabführungsblock Typ A 1/2
- Kontrollstabführungsblock Typ A 2/2
- Kontrollstabführungsblock Typ B
- Kontrollstabführungsblock Typ C
- Kontrollstabführungsblock Typ D
- Kontrollstabführungsblock Typ E 1/2
- Kontrollstabführungsblock Typ E 2/2
- austauschbarer Reflektorblock Typ A1 1/3
- austauschbarer Reflektorblock Typ A1 2/3
- austauschbarer Reflektorblock Typ A1 3/3
- austauschbarer Reflektorblock Typ A2 1/3
- austauschbarer Reflektorblock Typ A2 2/3
- austauschbarer Reflektorblock Typ A2 3/3
- austauschbarer Reflektorblock Typ B 1/2
- austauschbarer Reflektorblock Typ B 2/2
- austauschbarer Reflektorblock Typ C 1/2
- austauschbarer Reflektorblock Typ C 2/2
- austauschbarer Reflektorblock Typ D 1/4
- austauschbarer Reflektorblock Typ D 2/4
- austauschbarer Reflektorblock Typ D 3/4
- austauschbarer Reflektorblock Typ D 4/4

Anhang 25: Cs-137-Diffusionskoeffizienten im japanischen Referenzdatensatz im Vergleich zu der Definition im IAEA-Datensatz

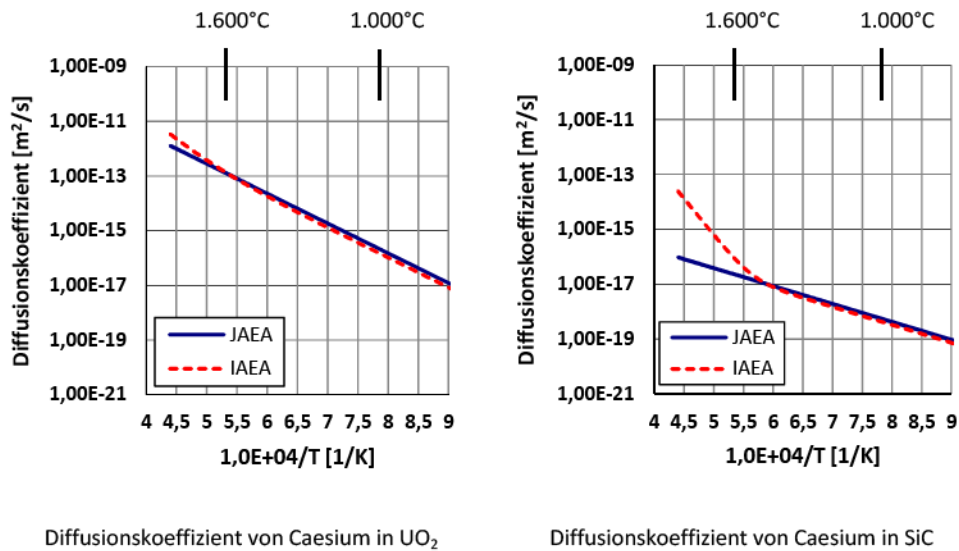
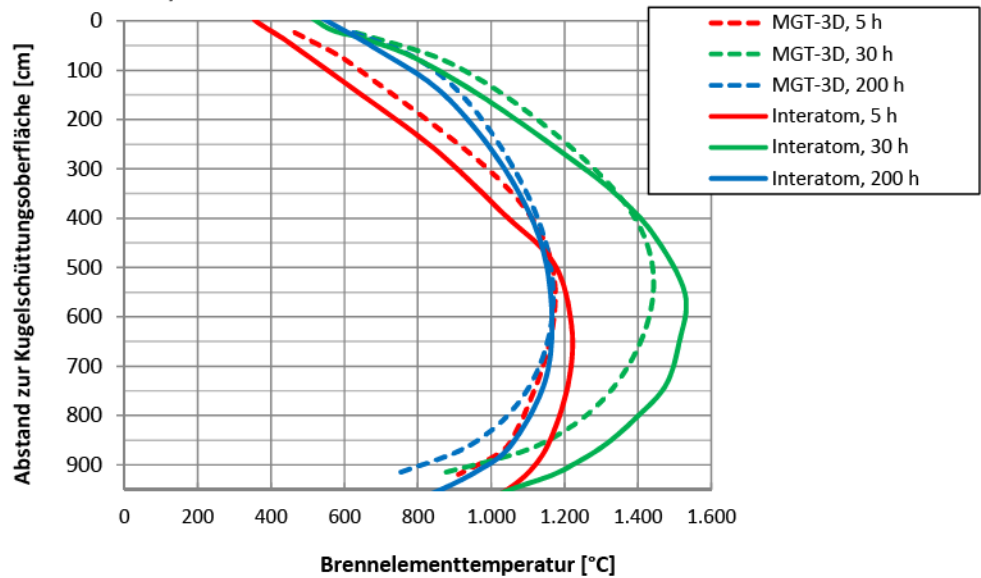


Abbildung A25.1: Vergleich der Diffusionskoeffizienten von Caesium in Urandioxid und Siliziumkarbid

Anhang 26: Vergleich zwischen mit MGT-3D berechneten und von Interatom berechneten Temperaturverläufen



Band / Volume 229

Mobile Messungen - Messung und Bewertung von Verkehrsemissionen

C. Ehlers (2014), VII, 136 pp

ISBN: 978-3-89336-989-8

Band / Volume 230

Data Processing and Trace Gas Retrievals for the GLORIA Limb Sounder

T. Guggenmoser (2014), xi, 111, XXVI

ISBN: 978-3-89336-993-5

Band / Volume 231

Assessment of Laser Induced Ablation Spectroscopy (LIAS) as a method for quantitative in situ surface diagnostic in plasma environments

N. Gierse (2014), 199 pp

ISBN: 978-3-89336-994-2

Band / Volume 232

Lattice-Boltzmann-Simulation in faserbasierten Mikrostrukturen

J. P. Brinkmann (2014), viii, 129 pp

ISBN: 978-3-89336-995-9

Band / Volume 233

Numerische Simulationen von Abfallgebinden aus der Wiederaufarbeitung von Kernbrennstoffen

S. Schneider (2014), 201 pp

ISBN: 978-3-89336-998-0

Band / Volume 234

Materials for Advanced Power Engineering 2014

J. Lecomte-Beckers, O. Dedry, J. Oakey, B. Kuhn (Ed.)

(2014), xxi, 930, viii pp

ISBN: 978-3-95806-000-5

Band / Volume 235

Untersuchungen zur Abtrennung, Konversion und Transmutation von langlebigen Radionukliden

Ein Beitrag zur fortschrittlichen Entsorgung von hochradioaktiven Abfällen

G. Modolo (2014), 291 pp

ISBN: 978-3-95806-005-0

Band / Volume 236

Keramische Membranen für die H₂-Abtrennung in CO-Shift-Reaktoren

D. van Holt (2014), IV, 169 pp

ISBN: 978-3-95806-007-4

Band / Volume 237

Entwicklung von porösen Silica-Membranen zur CO₂-Abtrennung aus dem Rauchgas fossil befeuerter Kraftwerke

J. S. Eiberger (2014), II, 163 pp

ISBN: 978-3-95806-008-1

Band / Volume 238

Development of a highly sensitive and versatile mass spectrometer system for laboratory and atmospheric measurements

S. Albrecht (2014), iv, 171 pp

ISBN: 978-3-95806-009-8

Band / Volume 239

High Temperature Corrosion of Alloys and Coatings in Gas-Turbines Fired with Hydrogen-Rich Syngas Fuels

W. Nowak (2014), 201 pp

ISBN: 978-3-95806-012-8

Band / Volume 240

Einfluss neuer Membranmaterialien auf Herstellung und Betrieb von Direktmethanol-Brennstoffzellen

S. Hürter (2014), V, 164 pp

ISBN: 978-3-95806-013-5

Band / Volume 241

Spannungsinduziertes Versagen in Hochtemperaturschichtsystemen

C. Nordhorn (2014), v, 118 pp

ISBN: 978-3-95806-016-6

Band / Volume 242

Änderungsdetektion digitaler Fernerkundungsdaten mittels objekt-basierter Bildanalyse

C. Listner (2014), 176 pp

ISBN: 978-3-95806-017-3

Band / Volume 243

Räumlich hoch aufgelöste Modellierung des Spaltprodukt-verhaltens in einem HTR-Core mit kugelförmigen oder prismatischen Brennelementen

A. Xhonneux (2014), viii, 236 pp

ISBN: 978-3-95806-020-3

Weitere *Schriften des Verlags im Forschungszentrum Jülich* unter
<http://www.zb1.fz-juelich.de/verlagextern1/index.asp>





Energie & Umwelt/ Energy & Environment
Band/Volume 243
ISBN 978-3-95806-020-3

